

**НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ
імені ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО»
Інженерно-фізичний факультет
Кафедра фізики металів**

«На правах рукопису»
УДК _____

«До захисту допущено»

В.о. завідувача кафедри

_____ Іващенко Є.В.

«___» _____ 20__ р.

**Магістерська дисертація
на здобуття ступеня магістра
зі спеціальності 132 Матеріалознавство
на тему: «Параметри поверхневої самодифузії в Ті, визначені моделюванням
методом молекулярної динаміки»**

Виконав:

студент II курсу, групи ФМ-71мп

Гривнак Артем Олександрович _____

Керівник:

Ст. викладач кафедри Конорев С.І. _____

Консультант з оформлення стартап – проекту:

Доцент, к.е.н., Глущенко Я.І. _____

Консультант з охорони праці та безпеки в
надзвичайних ситуаціях:

Професор д.т.н., Левченко О.Г. _____

Консультант з нормоконтролю:

Асистент, Шаповалова Н.А. _____

Рецензент:

Асистент кафедри ФХОТМ, к.т.н. Ворон М.М. _____

Засвідчую, що у цій магістерській дисертації
немає запозичень з праць інших авторів без
відповідних посилань.

Студент _____

Київ – 2018 року

Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»
Інженерно-фізичний факультет
Кафедра фізики металів

Рівень вищої освіти – другий (магістерський) за освітньо-професійною програмою
Спеціальність (спеціалізація) – 132 «Матеріалознавство» («Металофізичні процеси та їх комп'ютерне моделювання»)

ЗАТВЕРДЖУЮ

В.о завідувач кафедри

_____ Іващенко Є.В.

«__» _____ 20__ р.

ЗАВДАННЯ
на магістерську дисертацію студенту
Гривнаку Артему Олександровичу

1. Тема дисертації «Параметри поверхневої самодифузії в Ті, визначені моделюванням методом молекулярної динаміки», науковий керівник дисертації Конорев Сергій Ігорович, старший викладач кафедри, затверджені наказом по університету від «09» листопада 2018 р. №4127 - с
2. Термін подання студентом дисертації _____
3. Об'єкт дослідження: дифузійні процеси в моделі Ті при температурах 300 К, 500 К, 700 К, 900 К та 1100 К.
4. Вихідні дані : літературні дані, результати особистого експерименту
5. Перелік завдань, які потрібно розробити : 1) Провести моделювання монокристалів титану з вільною поверхнею для різних граней; 2) Визначити характер структурних недосконалостей для цих граней, та характер напружень; 3) Визначити коефіцієнт дифузії в чистому титані в залежності від напружень та температури; 4) Зробити висновки по отриманим даним, щодо поверхневої самодифузії титану.
6. Орієнтовний перелік графічного (ілюстративного) матеріалу : графіки, таблиці.
7. Орієнтовний перелік публікацій

8. Консультанти розділів дисертації*

Розділ	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		завдання видав	завдання прийняв
охорони праці та безпеки в надзвичайних ситуаціях	Професор д.т.н. Левченко О.Г.		
оформлення стартап – проекту	Доцент, к.е.н. Глущенко Я.І.		
нормоконтроль	Асистент, Шаповалова Н.А.		

9. Дата видачі завдання _____

Календарний план

№ з/п	Назва етапів виконання магістерської дисертації	Термін виконання етапів магістерської дисертації	Примітка
1	Аналіз літературних джерел	14.09.2018	
2	Опанування методики моделювання методом молекулярної динаміки	24.09.2018	
3	Розрахунок напружень в поверхневих шарах Ті	01.10.2018	
4	Розрахунок енергії формування вакансій та концентрації вакансій	15.10.2018	
5	Визначення залежностей параметрів дифузії від напружень	29.10.2018	
6	Аналіз та обробка отриманих результатів дослідження	12.11.2018	
7	Розробка стартап-проекту, охорони праці та безпеки в надзвичайних ситуаціях	19.11.2018	
8	Оформлення магістерської дисертації, створення презентації	03.12.2018	

Студент

Гривнак А.О.

Науковий керівник дисертації

Конорев С.І.

РЕФЕРАТ

Магістерська дисертація: 81 с., 10 табл., 35 рис., 71 джерело.

ДИФУЗИЯ, МОЛЕКУЛЯРНА ДИНАМІКА, МОДЕЛЮВАННЯ, ВАКАНСІЯ

Об'єкт дослідження – дифузійні процеси в моделі Ti при температурах 300 K, 500 K, 700 K, 900 K та 1100 K.

Мета роботи – шляхом моделювання визначити залежність параметрів поверхневої самодифузії Ti від температури та напружень.

Методи дослідження – метод молекулярної динаміки (МД).

Було створено 90 моделей (5 температур, з дефектом та без дефекту, з 3 різними початковими умовами, з напруженнями та без) і проведено моделювання методом МД з використанням MEAM потенціалу за допомогою програмного забезпечення LAMMPS.

Використовуючи результати моделювання було визначено, енергію формування вакансій та рівноважну концентрацію вакансій, коефіцієнти дифузії симуляції та істинні коефіцієнти дифузії за вакансійним механізмом, та їх залежності від напруження в поверхневих шарах Ti.

Були зроблені висновки про залежність енергії формування вакансій та рівноважну концентрацію вакансій для температур 300 K, 500 K, 700 K, 900 K, 1100 K. Були визначенні параметри поверхневої самодифузії для 3 граней монокристалу Ti для температур 300 K, 500 K, 700 K, 900 K, 1100 K.

ABSTRACT

Master thesis: 81 p., 10 tables, 35 figures, 71 sources.

DIFFUSION, MOLECULAR DYNAMICS, MODELING, VACANCY

The object of the research is the diffusion processes in the Ti model at temperatures of 300 K, 500 K, 700 K, 900 K and 1100 K.

The purpose of the work is to determine the equilibrium parameters of lattice Ti, the energy of formation and the equilibrium concentration of vacancies, simulation and true diffusion coefficients.

Methods of research – the method of molecular dynamics (MD).

90 models (5 temperatures with defect and without defect, with 3 different initial conditions, with stress and without) were created and simulated of MD method using the MEAM potential and the LAMMPS software.

Temperature dependence of the vacancies formation energy and the vacancies equilibrium concentration, simulation and true diffusion coefficients and their stress dependence on surface layers Ti were determined by results of MD simulations.

Conclusions about vacancy formation energies and equilibrium concentration at a temperature 300 K, 500 K, 700 K, 900 K, 1100 K was revealed. Parameters of surface self-diffusion for 3 surface of Ti monocrystal were determined for temperatures 300 K, 500 K, 700 K, 900 K, 1100 K.

ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК СКОРОЧЕНЬ, УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ, ТЕРМІНІВ	8
1 ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД	9
1.1 Основи методу молекулярної динаміки	9
1.1.1 Фізична основа методу молекулярної динаміки	9
1.1.2 Коротка історія розвитку методу МД	10
1.1.3 Огляд основних завдань, що вирішуються за допомогою МД	11
1.1.4 Обмеження класичної МД	12
1.2 Потенціал MEAM	14
1.3 Вплив вільної поверхні на структуру поверхневих шарів Ti	16
1.4 Висновки до розділу 1	19
2 МАТЕРІАЛИ ТА МЕТОДИКА	21
2.1 Розрахунок термодинамічних величин в методі молекулярної динаміки ...	21
2.1.1 Загальні співвідношення	21
2.1.2 Потенціальна, кінетична і повна енергія	22
2.1.3 Температура	23
2.1.4 Розрахунок атомних напружень в молекулярній динаміці	24
2.2 Розрахунок дифузійних параметрів	27
2.2.1 Середньоквадратичні відхилення і дифузія	27
2.2.2 Розрахунок енергії формування вакансій та рівноважної концентрації вакансій	30
3 ТЕОРЕТИЧНІ ДОСЛІДЖЕННЯ ТА ОБГОВОРЕННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ	31
3.1 Опис моделей	31
3.2 Параметри об'ємної самодифузії за вакансійним механізмом	32
3.2.1 Рівноважні параметри ґраток	32
3.2.2 Рівноважна енергія формування вакансій та рівноважна концентрація вакансій	34
3.2.3 Коефіцієнт дифузії симуляції та реальний коефіцієнт дифузії	35
3.3 Параметри поверхневої самодифузії ідеальних монокристалів	36

3.3.1 Напруження в поверхневих шарах Ті внаслідок дії вільної поверхні	36
3.3.2 Залежність енергії формування вакансії та концентрації вакансій в Ті від напружень	45
3.3.3 Залежність параметрів дифузії від напружень	47
3.3.4 Параметри поверхневої самодифузії титану	47
3.4 Висновки до розділу 3.....	51
4 РОЗРОБКА СТАРТАП-ПРОЕКТУ.....	53
4.1 Зміст ідеї стартапу	53
4.2 Висновки до розділу 4.....	56
5 ОХОРОНА ПРАЦІ ТА БЕЗПЕКА В НАДЗВИЧАЙНИХ СИТУАЦІЯХ	58
5.1 Аналіз роботи в приміщенні	58
5.1.1 Склад повітря робочої зони	60
5.2 Електробезпека	61
5.3 Інженерні рішення.....	62
5.3.1 Освітлення.....	62
5.3.2 Аналіз природного освітлення	64
5.3.3 Аналіз штучного освітлення	67
5.4 Забезпечення безпеки та запобігання надзвичайним ситуаціям	68
5.4.1 Пожежна безпека	69
5.5 Висновки до розділу 5.....	71
ВИСНОВКИ.....	72
CONCLUSIONS	74
СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ	76

ПЕРЕЛІК СКОРОЧЕНЬ, УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ, ТЕРМІНІВ

МД – молекулярна динаміка

МЗА – метод зануреного атома

ММЗА – модифікований метод зануреного атома

EAM – embedded atom method

MEAM – modified embedded atom method

EMT – effective medium theory

ЕОМ – електронно обчислювальна машина

НДР – науково-дослідницька робота

CVD – chemical vapor deposition

ПГУ – періодичні граничні умови

ГЦП – гексагональна щільного пакування

ГЦК – гранецентрована кубічна

QH – квазігармонічне наближення

1 ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД

1.1 Основи методу молекулярної динаміки

1.1.1 Фізична основа методу молекулярної динаміки

Методом молекулярної динаміки (МД) називається метод моделювання, який заснований на розрахунку еволюції системи взаємодіючих частинок (атомів, молекул) шляхом інтегрування рівнянь їх руху. МД може бути класичної або квантової. Нашу основну увагу в цьому курсі буде приділено вивченню класичної МД [1].

У класичній МД вирішується система рівнянь II закону Ньютона:

$$m_i \vec{a}_i = \vec{F}_i, \quad (1.1)$$

де m_i – маса цієї частинки,

a_i – її прискорення,

F_i – сила, що діє на неї

МД є детерміністичним методом: якщо відомі початкові координати і швидкості частинок, в принципі може бути описана еволюція системи в будь-які моменти часу. У той же самий час, МД являє собою метод статистичної фізики. Комп'ютер розраховує траєкторію системи в $6N$ – мірному фазовому просторі ($3N$ координат і $3N$ імпульсів). Однак ця траєкторія сама по собі інтересу не представляє. Головний сенс використання методу полягає в тому, що генерується сукупність конфігурацій, розподілених за певними законами розподілу, тобто статистичний ансамбль. Прикладами таких ансамблів є канонічний ансамбль, відповідний розподілу ймовірностей в фазовому просторі, що забезпечує збереження енергії, або канонічний ансамбль, в якому постійна температура. Траєкторія, отримана МД, дає таку сукупність конфігурацій. Таким чином, вимір будь-якої фізичної величини шляхом моделювання зводиться до усереднення

різних миттєвих значень, прийнятих цією величиною в різні послідовні моменти часу.

Статистична фізика є сполучною ланкою між мікроскопічною поведінкою і термодинамікою. У межі дуже великих проміжків часу моделювання можна очікувати, що всі точки фазового простору системою будуть відвідані відповідно до їх ймовірності, і тоді усереднення призвело б до термодинамічних величин. На практиці, однак, МД моделювання проводиться в обмежений часовий інтервал, тому такий розрахунок повинен бути зроблений з обережністю, і з аналізом чи досягнуто рівноважний стан системи чи ні. Таким шляхом за допомогою МД визначаються рівноважні термодинамічні величини і вивчається, наприклад, фазову діаграму матеріалів. Крім цього, за допомогою МД вивчаються також нерівноважні процеси, як, наприклад, дифузія. І, нарешті, МД може бути використана для визначення рівноважних структур (для чого використовується також викладена вище молекулярна статика), причому в багатьох випадках МД дозволяє долати локальні мінімуми і знаходити глобальний мінімум.

1.1.2 Коротка історія розвитку методу МД

Вперше метод МД був використаний Алдером і Уейнрайтом (Alder, Weinwright) в 1957 р. в їх роботі була досліджена фазова діаграми системи твердих сфер, тобто переходи між рідким і твердим станами цих систем. Розрахунки були проведені на комп'ютері IBM-704 (що має об'єм оперативної пам'яті 4 Кб).

У 1960 р. Гібсоном, Голандом, Мілграмом і Віньярдом в Брукхавенській національній лабораторії було проведено МД моделювання радіаційного дефектоутворення в міді. Це було перше використання МД з безперервним потенціалом і кінцево-різничною інтеграцією рівнянь руху. Розрахунки для системи в 500 атомів були проведені на комп'ютері IBM-704 і займали близько 1 хв. на один крок за часом.

Рамен (Rahman, Аргонська нац. лаб.) – один з відомих піонерів в МД. У 1964 р. він вивчив за допомогою потенціалу Леонарда Джонса властивості рідкого Ar. Розглядалася система з 864 атомів на комп'ютері CDC-3600. Л. Верле (Verlet) в 1967 р. також вивчав властивості рідкого Ar, в цих дослідженнях він ввів поняття списку сусідів Верле, а також метод інтегрування рівнянь руху, так званий алгоритмом Верле, які в даний час широко використовуються.

У 1981 р. Парінелло (Parinello) і Рамен запропонували метод МД при постійному тиску, в 1984 р. Нозе (Nosé) запропонував метод МД при постійній температурі. Тепер ці методи є класичними [2].

Зі збільшенням можливостей комп'ютерів росли також розміри модульованих систем і спектр завдань, що вирішуються за її допомогою. У 1993 р. Ломдалем (Lomdahl) було реалізовано моделювання росту тріщини в системі, що містить 250 млн. атомів, а вже в 2000 р. була змодельована система з 5 млрд. атомів.

1.1.3 Огляд основних завдань, що вирішуються за допомогою МД

Неможливо перелічити всі завдання фізики конденсованих середовищ, які вирішуються за допомогою МД.

Розвиток МД почався з моделювання рідин, і в даний час цей метод є одним з основних. Розробка потенціалів для нових систем дозволяє вивчати як прості, так і багатокомпонентні рідини; вивчаються як рівноважні системи, так і нерівноважні процеси, такі як в'язкість, теплопровідність, дифузія і т.п.

Інший напрямок додатків МД, розпочате на зорі розвитку методу – вивчення дефектів в кристалах – до сих пір є надзвичайно важливим напрямом. За допомогою МД визначається структура і енергія, напруги різних дефектів: вакансій і міжвузельних атомів, дислокацій, дефектів упаковки, меж зерен і т.п. Триваючий розвиток міжатомних потенціалів дозволяє вивчати ці дефекти з новим ступенем подробиць і точності.

Крім вивчення структури, все більшого розповсюдження набуває вивчення за допомогою МД процесів в твердих тілах: пластичної деформації, руйнування, дифузії, тертя.

Вивчення фазових перетворень, в тому числі між агрегатними станами однієї і тієї ж речовини, побудова фазових діаграм також складають один із напрямів застосування МД.

Для нанотехнологій великий інтерес представляє можливість використання МД для вивчення процесів на поверхні твердих тіл: перебудов поверхні, осадження, а також для вивчення структури і властивостей кластерів і наночастинок, великих молекул, в тому числі біологічних.

1.1.4 Обмеження класичної МД

У МД квантове рівняння Шредінгера замінюється класичними рівняннями Ньютона. Ця заміна справедлива, коли довжина хвилі Де-Бройля λ , відповідала тепловому руху атома, набагато менше найкоротшої міжатомної відстані $b \approx 3 \times 10^{-10}$ м. Маючи для довжини хвилі Де-Бройля і швидкості теплового руху частинок формули:

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{Mv}, \quad v = \sqrt{\frac{3kT}{M}}, \quad (1.2)$$

де M – маса частинок,

T – температура

Підставляючи значення фізичних констант в співвідношення (1.3), можна показати, що класичні рівняння справедливі, якщо $M / m_p \gg 0.2$. З умови $\lambda \ll b$ можна отримати співвідношення, що визначає придатність класичного опису:

$$\frac{M}{m_p} \gg \frac{4\pi^2\hbar^2}{3kTb^2m_p}, \quad (1.3)$$

де m_p – маса протона (рівна приблизно 1 а.е.м.)

Це означає, що для всіх атомів, за винятком найбільш легких, застосування класичних рівнянь руху виправдано. Класичне МД застосовується для таких легких елементів, як H_2 , He, Ne.

Крім того, квантові ефекти стають суттєвими при низьких температурах. Наприклад, нижче температури Дебая відбувається падіння теплоємності, аномально поводить теплове розширення. Отже, в цій області температур класична МД не може бути використана для вивчення динаміки решітки (спектра коливань). Але для вивчення структури матеріалів МД може бути застосовано при всіх температурах [3].

Крім цих, фізично обґрунтованих умов, існують також обмеження, пов'язані з можливостями інтегрування рівнянь руху. Ці обмеження зводяться до обмеження розмірів досліджуваних систем і проміжків часу, протягом яких можуть розглядатися процеси. У типових завданнях на сьогоднішній день розглядаються системи, що містять мільйони атомів, і процеси протягом часу порядку 1 нс. Для систем меншого розміру проміжки часу можуть бути збільшені до сотень наносекунд, і, відповідно, для менших проміжків часу розміри системи можуть бути збільшені до декількох мільярдів. Для того щоб уявити масштаб такої системи, відзначимо, що для нікелю, атомний об'єм якого дорівнює приблизно 10^{-2} м^3 , система з 1 млрд. атомів займає обсяг куба зі сторонами приблизно 300 нм.

Різні релаксаційні процеси в твердих тілах мають різні часи релаксації. Для визначення рівноважних властивостей необхідно дочекатися встановлення термодинамічної рівноваги, тобто час моделювання повинно перевищувати час релаксації. Тому за допомогою МД можуть моделюватися досить малі системи (розміром не більше 300 нм) і мають досить малий час релаксації процеси (не більше 100 нс). Наприклад, дифузія в твердих тілах має час релаксації багато годин або навіть років – тому цей процес при низьких температурах не має сенсу безпосередньо моделювати за допомогою МД.

1.2 Потенціал MEAM

Починаючи з 1980-х рр. був запропонований ряд методів опису міжатомних взаємодій, в основі яких, по суті, лежить теорія функціонала щільності. Спочатку ці методи були обґрунтовані виходячи з різних фізичних міркувань, але всі вони призводять до схожих виразів для енергії твердого тіла. Ці методи наступні: метод зануреного (або впровадженого) атома МЗА (Embedded atom method, EAM), метод ефективного середовища (Effective medium theory, EMT), потенціал Фінніс-Сінклера, клейова модель Ерколессі і т.д. У всіх цих моделях повна потенційна енергія твердого тіла, що складається з N атомів, представляється у вигляді:

$$U = \sum_{i=1}^N U_i, \quad U_i = F_i(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \phi_{ij}(r_{ij}), \quad (1.4)$$

$$\rho_i = \sum_{j \neq i} f_j(R_{ij}), \quad (1.5)$$

де F, f, ϕ – певні функції, конкретна інтерпретація яких залежить від методу.

Наприклад, в методі ефективного середовища і МПА ρ_i – щільність електронів у вузлі з номером i , F_i – енергія впровадження атома i в цю електронну щільність, ϕ_{ij} – енергія парної взаємодії між атомами i та j , причому щільність електронів в кожному вузлі є суперпозицією електронної щільності окремих атомів, тобто f являє собою електронну щільність, створювану одним атомом.

Енергія парного взаємодії являє собою позитивну енергію відштовхування іонних кістяків атомів, які заряджені позитивно. Складові потенційної енергії в МПА схематично зображено на рисунку 1.1.

Перевагою МПА в порівнянні з парними потенціалами є ефективний облік багато-частинкової взаємодії, який здійснюється функцією впровадження $F(\rho)$. Саме завдяки цьому члену тепер потенціал здатний описувати зменшення енергії зв'язку, що припадає на одну зв'язок, при збільшенні координаційної числа.

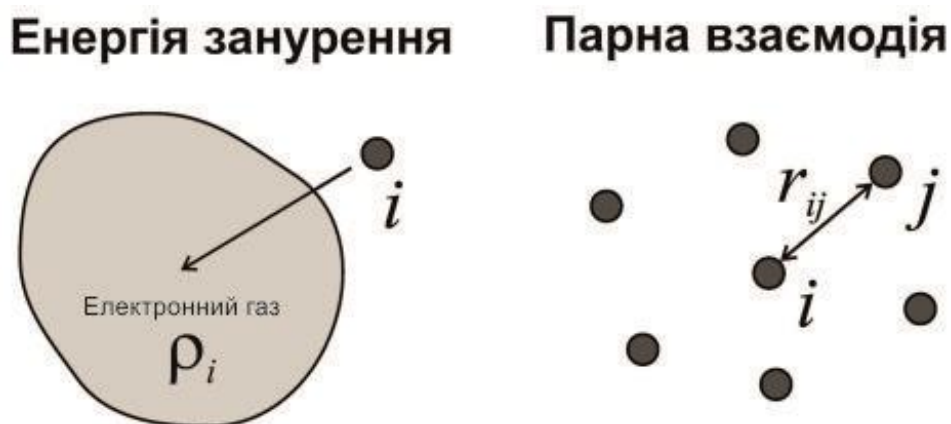


Рисунок 1.1 – Схематичне зображення складових потенціалу в методі зануреного атома [4]

Конкретна функціональна форма і параметри потенціалів можуть бути визначені двома способами. Перший шлях – це розрахунки з перших принципів, тобто з теорії функціонала щільності. Однак розрахунки такого типу поки не дозволяють будувати досить точні потенціали. Другий шлях – це підбір функціональної форми і параметрів таким чином, щоб отримати певний набір властивостей кристалів, що співпадає з експериментальними значеннями. Потенціали МПА підганяються під наступні властивості: параметри решітки, енергію зв'язку кристала E_{cv} , пружні константи (для ГЦК металів c_{11} , c_{22} і c_{44}) і енергію утворення вакансій E_f .

Дійсно, щільність електронів як сума щільності, створюваних оточуючими атомами, пропорційно збільшується зі збільшенням координаційного числа. Якби $F(\rho)$ функція залежала від ρ лінійно, то вона б також збільшувалася пропорційно координаційному числу, і потенціал в цілому поведився б як парний. Але $F(\rho)$ залежність нелінійна і має позитивну другу похідну, тобто, увігнута. Це призводить до того, що повна потенційна енергія взаємодії, яка припадає на один атом, з координаційним числом, зменшується.

МПА дозволяє уникнути і багатьох інших недоліків парних потенціалів. Він дає правильну оцінку енергії освіти вакансії, так як він до неї підганяється. Він

підганяється також до всіх пружним постійним, тому співвідношення Коші буде порушено [9].

Як приклад розглянемо аналітичний потенціал МПА, розроблений Джонсоном. Джонсоном був запропонований наступний простий функціональний вигляд щільності електронів, парного потенціалу та енергії впровадження:

$$f(r) = f_e \exp \left[-\beta \left(\frac{r}{r_e} - 1 \right) \right], \quad r \leq r_c \quad (1.6)$$

$$\varphi(r) = \varphi_e \exp \left[-\gamma \left(\frac{r}{r_e} - 1 \right) \right], \quad r \leq r_c \quad (1.7)$$

$$F(\rho) = -E_{cs} \left[1 - \frac{\alpha}{\beta} \ln \left(\frac{\rho}{\rho_e} \right) \right] \left(\frac{\rho}{\rho_e} \right)^{\alpha/\beta} - \Phi_e \left(\frac{\rho}{\rho_e} \right)^{\gamma/\beta} \quad (1.8)$$

У цих виразах $\alpha = 3\sqrt{V_a B / \varepsilon_0}$, де B – модуль всебічного стиску, V_a – атомний об'єм. Крім того, $\rho_e = 12f_e$ і $\Phi_e = 6\varphi_e$. Є параметри $\varphi_e, \beta, \gamma, r_c$, які визначаються підгонкою до характеристик матеріалу – параметру решітки a_0 або атомному об'єму V_a , енергії зв'язку ε_0 , енергії утворення вакансії E_v , модулю всебічного стиснення B і модулю зсуву G [9].

1.3 Вплив вільної поверхні на структуру поверхневих шарів Ті

Характер поверхневої релаксації корелює з щільністю пакування атомів в площинах для чистого титану. Найбільш щільно упакована площина в ГЦП ґратці – (0001). Для Ті (0001) щільність пакування при кімнатній температурі становить $1,323 \times 10^{-15}$ атом / см². В подальшому, для зручності ми будемо використовувати щільність пакування відносно площини (0001), для площини (0001) – 1, для площини (1 $\bar{1}$ 00) – 0,9412, для площини (11 $\bar{2}$ 0) – 0,6275.

Ті (0001). Відомо, що для чистого титану істотним є вплив вільної поверхні на 1 міжплощинну відстань, з максимальним значенням -0,05 (стискання) (рис. 1.2).

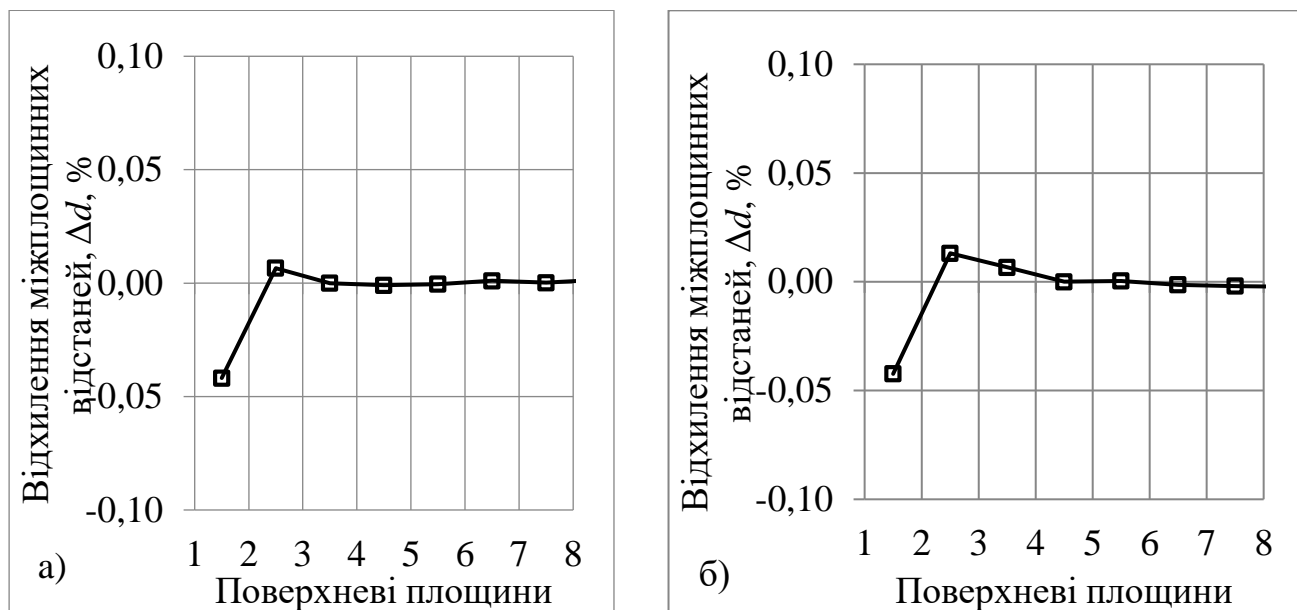


Рисунок 1.2 – Залежності відхилення значення міжплосинних відстаней від об'ємного значення Δd для грані (0001) Ti при температурах 300 К (а), та 400 К (б)

Ti ($1\bar{1}00$). Для цієї грані, вплив вільної поверхні розповсюджується на 2 міжплосинні відстані (рис. 1.3)

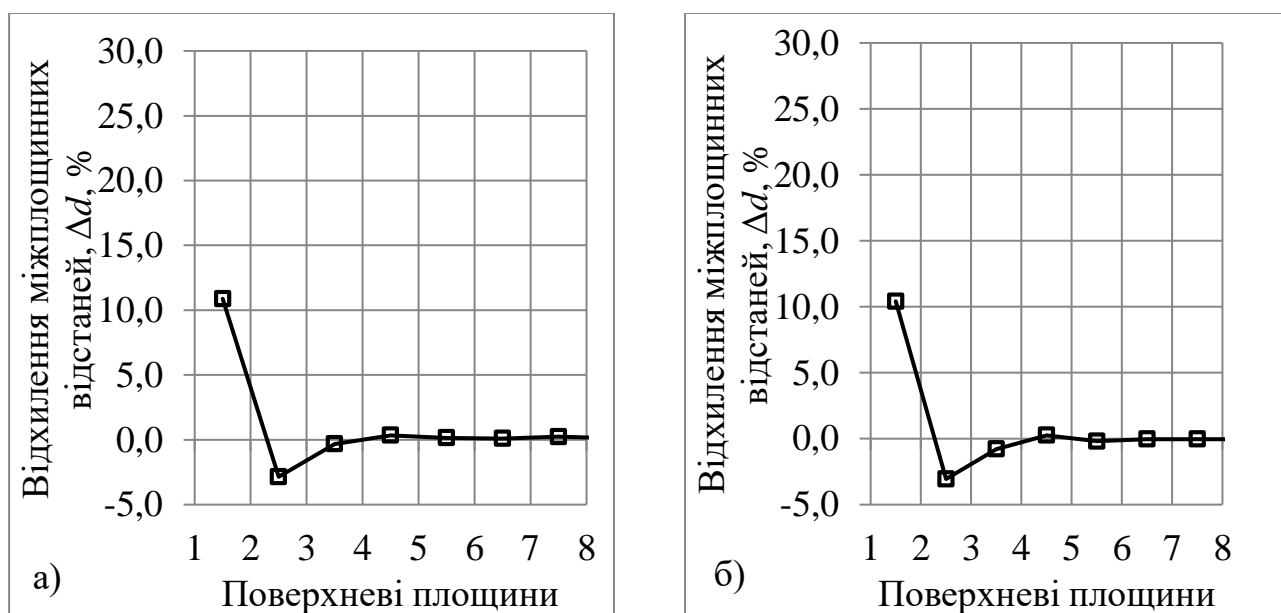


Рисунок 1.3 – Залежності відхилення значення міжплосинних відстаней від об'ємного значення Δd для грані ($1\bar{1}00$) Ti при температурах 300 К (а), та 400 К (б)

Ti ($11\bar{2}0$). В цій системі щільність пакування атомів в шарі найменша (з 3-ох які ми розглядали), тому логічним є найбільша глибина впливу вільної поверхні. Вона становить 3 міжплощинних відстані, максимальне значення відхилень міжплощинної відстані (Δd) спостерігається також для першої міжплощинної відстані і становить -15 % (стискання) (рис. 1.4).

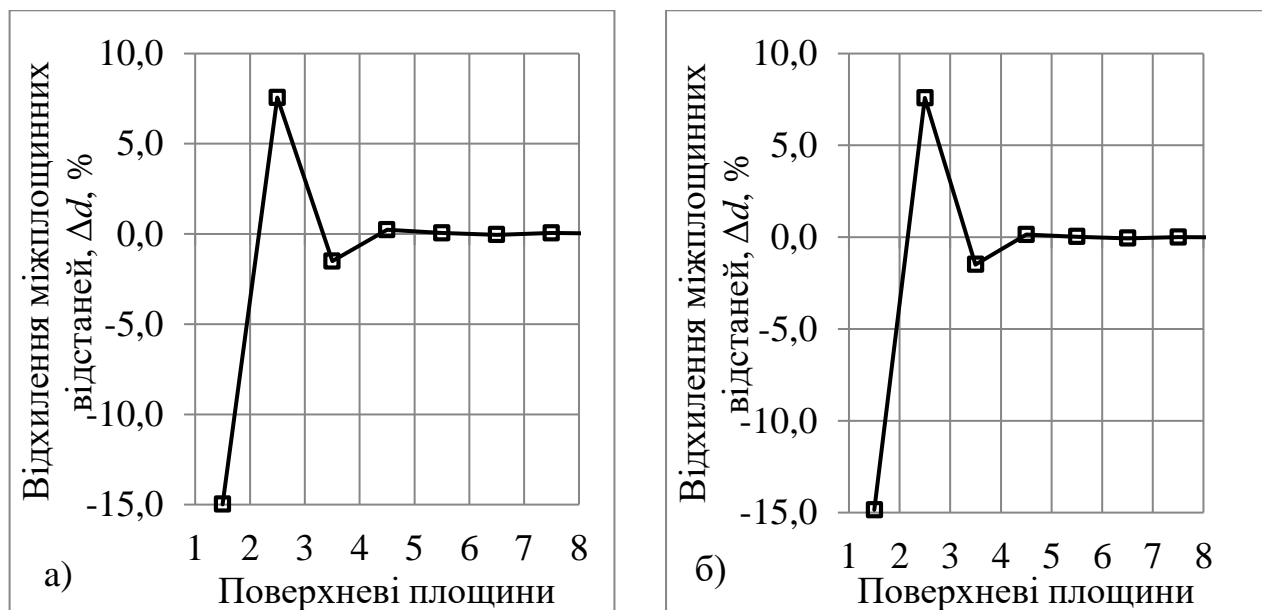


Рисунок 1.4 – Залежності відхилення значення міжплощинних відстаней від об'ємного значення Δd для грані ($11\bar{2}0$) Ti при температурах 300 К (а), та 400 К (б)

Глибина впливу вільної поверхні Ti корелює з щільністю пакування площини, що виходить на поверхню, і становить для найбільш щільно спакованої грані (0001) Ti – 1 міжплощинну відстань, для найменш щільно спакованої ($11\bar{2}0$) Ti – 3 міжплощинних відстані (рис. 1.5).

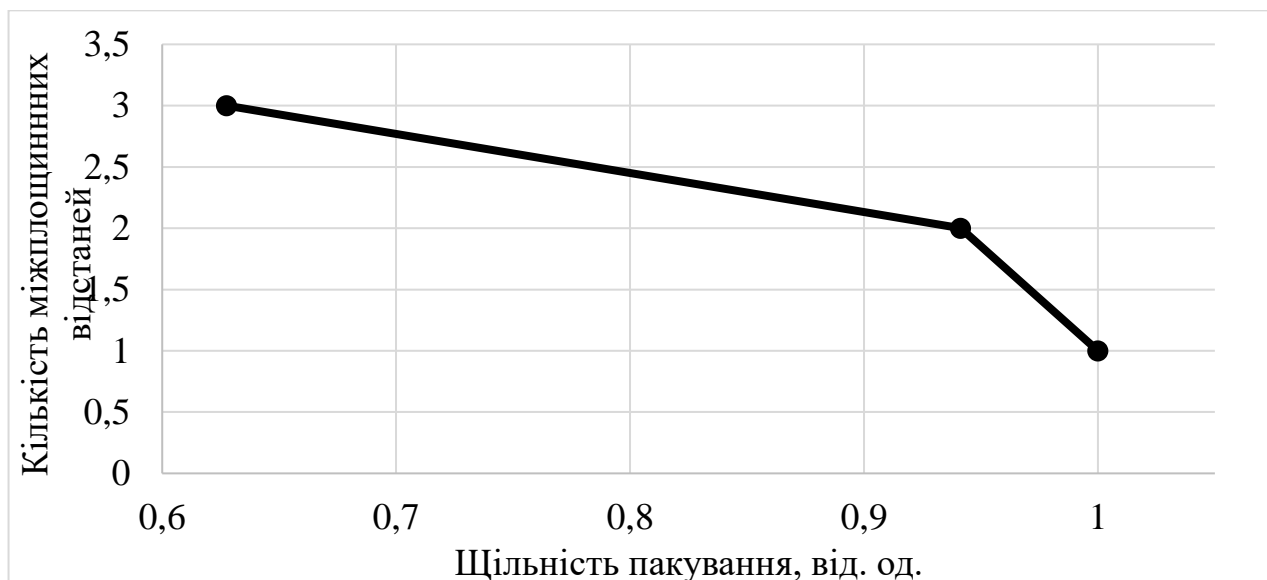


Рисунок 1.5 – Залежність глибини впливу вільної поверхні від щільності пакування при температурах 300 К

1.4 Висновки до розділу 1

1) За допомогою методів молекулярної динаміки (МД), є можливість ефективно досліджувати дефекти в ідеальних кристалічних структурах, можна визначити структуру атомів, зміну енергії, напруження в цілому та в окремих складових складних систем. Тому для нанотехнологій великий інтерес представляє можливість використання методів МД для вивчення процесів на поверхні твердих тіл: перебудови поверхні, осадження, а також для вивчення структури і властивостей кластерів і наночастинок, великих молекул, в тому числі біологічних.

2) Вільна поверхня фактично є дефектом для ідеальної кристалічної ґратки. Глибина впливу вільної поверхні залежить від багатьох факторів і для різних матеріалів має різний характер. Впливом вільної поверхні можна знехтувати коли розмір структурних елементів більше нанометрового діапазону. Але коли розмір структурних елементів знаходиться у нанометровому діапазоні поверхня відіграє важливу, а іноді і вирішальну роль.

3) Структурно найстабільнішою є грань (0001) Ті в системах з якою найменша глибина впливу вільної поверхні і найменші відхилення значень міжплощинних відстаней, яке не перевищує 2 %.

4) Напруження на гранях (0001) , $(1\bar{1}00)$, $(11\bar{2}0)$ монокристалу Ті корелюють зі щільністю пакування площин паралельних поверхні.

2 МАТЕРІАЛИ ТА МЕТОДИКА

2.1 Розрахунок термодинамічних величин в методі молекулярної динаміки

2.1.1 Загальні співвідношення

Коли після певного числа кроків МД в системі встановилася рівновага, можна "вимірювати" її термодинамічні параметри. Для цього значення відповідних динамічних величин усереднюють по часу. Фізичні властивості динамічних величин, як правило, є функціями координат і швидкостей. Припустимо, миттєве значення деякої фізичної величини в момент часу t дорівнює:

$$A(t) = f(\vec{r}_1(t), \dots, \vec{r}_N(t), \vec{v}_1(t), \dots, \vec{v}_N(t)) \quad (2.1)$$

Тоді її середнє значення дорівнює:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{N_T} \sum_{k=1}^{N_T} A(k), \quad (2.2)$$

де k – індекс, який пробігає кроки за часом від 1 до деякого великого числа N_T .

Є два еквівалентних шляхи практичної реалізації такого усереднення.

1. $A(t)$ розраховується на кожному кроці за часом в процесі "прогонки" програми МД. Сума також оновлюється після кожного кроку. В кінці роботи програми МД середнє значення знаходиться відразу діленням суми на число кроків. Цей спосіб кращий, коли розрахунок величини простий або дуже важливий. Наприклад, температура системи повинна розраховуватися таким чином.

2. У процесі роботи програми МД координати (i / або швидкості) періодично записуються в файл. Окрема програма, яка запускається після МД, обробляє записані дані, розраховуючи необхідні середні.

Цей спосіб вимагає великого обсягу на диску, так як пов'язаний зі збереженням $6N$ величин (координат і проекцій швидкостей всіх часток) для кожного з великого числа кроків. Однак він зручний в іншому відношенні: програма МД проганяється тільки один раз, а її результати можуть бути багато разів використані для розрахунку різних термодинамічних величин. Цей метод використовується, якщо розраховуються величини складні, пов'язані з використанням даних в різні моменти часу і т.д.

2.1.2 Потенціальна, кінетична і повна енергія

Середня потенційна енергія U визначається усередненням його миттєвого значення, який враховується в будь-який момент часу в процесі розрахунку сил, що діють на атоми. Наприклад, в разі парних потенціалів:

$$U = \left\langle \sum_i \sum_{j>i} \varphi(|\vec{r}_i(t) - \vec{r}_j(t)|) \right\rangle \quad (2.3)$$

Хоча для інтегрування рівнянь руху середня потенційна енергія не потрібна, вона потрібна для розрахунку повної енергії і перевірки її збереження. Остання є важливою перевіркою будь-якого МД-моделювання.

Розрахунок середньої кінетичної енергії дуже простий:

$$K = \langle K(t) \rangle = \left\langle \frac{1}{2} \sum_i m_i v_i^2(t) \right\rangle \quad (2.4)$$

Повна енергія замкнутої системи $E = K + U$ в класичній механіці є величина постійна. Однак зазвичай на кожному кроці ця величина розраховується, і перевіряється її збереження.

Іншими словами, при моделюванні енергія безперервно "перетікає" з кінетичної в потенційну і навпаки, викликаючи флуктуації і близько їх середніх значень, тоді як їх сума залишається незмінною.

Насправді можуть мати місце невеликі флуктуації повної енергії порядку 10^4 від середнього значення або менше, пов'язані з похибками в інтегруванні рівнянь руху. Ці флуктуації можуть бути зменшені скороченням кроку за часом.

При дуже великих часах моделювання можливо також повільне відхилення повної енергії в одну сторону, яке може бути пов'язане із занадто великим кроком по часу. Таке відхилення – більш небажане явище, ніж флуктуації, так як призводить до зміни термодинамічного стану системи, в зв'язку з чим середні за часом по тривалому проміжку часу не відповідають одному стану. Якщо відхилення мають місце, їх можна уникнути шляхом поділу всього тривалого проміжку часу на більш короткі інтервали і відновлення заданого значення енергії перед кожною з коротких прогонів. Для відновлення енергії зазвичай змінюється кінетична енергія шляхом множення всіх швидкостей на необхідний множник.

Хоча шляхом зменшення тимчасового кроку можна досягти більш точного збереження енергії, занадто сильне зменшення призводить до втрати комп'ютерного часу. Тому зазвичай досягають компромісу між невеликими флуктуаціями енергії і, можливо, слабким її відхиленням, і досить великими інтервалами часу, які потрібно моделювати.

2.1.3 Температура

Температура T безпосередньо пов'язана з кінетичною енергією добре відомої теоремою про рівномірний розподіл кінетичної енергії за ступенями свободи. Так як система N частинок має $3N$ ступенів свободи, їх кінетична енергія дорівнює:

$$K = \frac{3}{2} N k_B T \quad (2.5)$$

Отже, температура розраховується безпосередньо з середньої кінетичної енергії K . Для практичних цілей корисно буває також визначити "миттєву температуру" $T(t)$, пропорційну миттєвій кінетичній енергії $K(t)$.

2.1.4 Розрахунок атомних напружень в молекулярній динаміці

Напруження – це, взагалі кажучи, поняття механіки суцільного середовища. Однак виявляється, що на атомному рівні також можна ввести напруги, які в межі, при усередненні по великим атомним системам, узгоджуються з континуальним поняттям напружень. Поняття про напруги було введено раніше при розрахунку пружних констант за допомогою парних потенціалів. Тут ми розглянемо це поняття більш детально.

Спочатку коротко згадаємо макроскопічні поняття про тензори деформацій і напружень. Коли тверде тіло деформується, радіуси-вектори його частинок (в континуальному наближенні – нескінченно малих обсягів, що розглядаються як матеріальні точки) отримують прирости, звані векторами зсуву:

$$\vec{u}(\vec{r}) = \vec{r}' - \vec{r} \quad (2.6)$$

При неоднорідній деформації зсуви залежать від координат. У лінійної теорії пружності, коли зміщення малі, відносна деформація характеризується тензором другого рангу, який називається тензором деформацій:

$$\epsilon^{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u^{\alpha}}{\partial r^{\beta}} + \frac{\partial u^{\beta}}{\partial r^{\alpha}} \right) \quad (2.7)$$

де грецькі верхні індекси позначають компоненти векторів зсуву і радіус-вектора (для зручності подальшого викладу, ми будемо користуватися верхніми грецькими індексами для позначення компонент векторів і тензорів, залишаючи нижні латинські індекси для нумерації частинок).

Тензор напружень вводиться як тензор, компонент якого є силою в напрямку осі α , що діє на одиницю площадки з нормаллю вздовж осі β . У лінійної теорії пружності тензори напружень і деформацій пов'язані законом Гука:

$$\sigma^{\gamma\delta} = c_{\gamma\delta\alpha\beta} \epsilon^{\alpha\beta} \quad (2.8)$$

де по повторюваним індексам мається на увазі підсумовування.

Енергія деформованого твердого тіла в одиниці об'єму визначається співвідношенням:

$$w = \frac{1}{2} \sigma^{\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha\beta} \quad (2.9)$$

Звідси випливає, що тензор напружень може бути визначений як тензор з компонентами:

$$\sigma^{\alpha\beta} = \frac{\partial w}{\partial \varepsilon_{\alpha\beta}} \quad (2.10)$$

Саме це співвідношення має бути в визначення напружень і на атомному рівні. З точки зору атомізму, потенційна енергія твердого тіла визначається сумою енергій окремих її частинок:

$$U = \sum_{i=1}^N U_i(\vec{r}_i) \quad (2.11)$$

Середню по системі напруги тоді визначають як:

$$\sigma^{\alpha\beta} = \frac{1}{V} \frac{\partial U}{\partial \varepsilon_{\alpha\beta}} \quad (2.12)$$

За повної аналогії з цим, локальне напруження близько атома і (атомне напруга) визначається наступним співвідношенням:

$$\sigma_i^{\alpha\beta} = \frac{1}{V_i} \frac{\partial U_i}{\partial \varepsilon_{\alpha\beta}} \quad (2.13)$$

де замість об'єму системи V тепер використовується атомний об'єм V_i .

При приближенні парної взаємодії енергія атома рівна:

$$U_i = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N (j \neq i) \varphi(r_{ij}) \quad (2.14)$$

При деформації, описуваної тензором $\varepsilon^{\alpha\beta}$, міжатомні відстані r_{ij} відчують зміни, компоненти яких рівні $u_{ij}^{\beta} = r_{ij}^{\alpha} \varepsilon_{\alpha}^{\beta}$, тобто $\vec{u}_{ij} = \vec{r}'_{ij} - \vec{r}_{ij}$, де \vec{r}_{ij} – недеформований радіус-вектор. Потенційна енергія атома може бути розкладена в ряд Тейлора по малим зсувам у околиці недеформованих значень r_{ij} :

$$U_i = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \left\{ \varphi(r_{ij}) \Big|_{r_{ij}} + \frac{\partial \varphi(r_{ij})}{\partial r_{ij}^\beta} \Big|_{r_{ij}} u_{ij}^\beta + \dots \right\}, \quad (2.15)$$

де знову по повторюваним індексам мається на увазі підсумовування, а значення функції і її похідної розраховуються при рівноважних відстанях.

При малих деформаціях цей ряд обривається в першому наближенні. Член нульового наближення є енергія системи в недеформованому стані, а першого наближення – пружна енергія. Використовуючи співвідношення $u_{ij}^\beta = r_{ij}^\alpha \varepsilon^{\alpha\beta}$, енергію можна переписати у вигляді:

$$U_i = U_i(0) + \frac{1}{2} \sum_{j=1(j \neq i)}^N \frac{\partial \varphi(r_{ij})}{\partial r_{ij}^\beta} \Big|_{r_{ij}} r_{ij}^\beta \varepsilon^{\alpha\beta} \quad (2.16)$$

Звідси легко визначити атомну напругу в атомі i :

$$\begin{aligned} \sigma_i^{\alpha\beta} &= \frac{1}{2V_i} \sum_{i \neq j} \frac{\partial \varphi(r_{ij})}{\partial r_{ij}^\beta} \Big|_{r_{ij}} r_{ij}^\alpha = \frac{1}{2V_i} \sum_{i \neq j} \frac{\partial \varphi(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \frac{\partial r_{ij}}{\partial r_{ij}^\beta} r_{ij}^\alpha = \\ &= \frac{1}{2V_i} \sum_{i \neq j} \frac{\partial \varphi(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \frac{r_{ij}^\alpha r_{ij}^\beta}{r_{ij}} \end{aligned} \quad (2.17)$$

При виведенні останньої частини – цієї формули було використано співвідношення:

$$\frac{\partial r_{ij}}{\partial r_{ij}^\beta} = \frac{r_{ij}^\beta}{r_{ij}} \quad (2.18)$$

При використанні МПА вирази для тензора напружень кілька складніші, але їх розрахунок також не представляє великих труднощів.

З виразу (2.25) видно, що для розрахунку локальної напруги в місці розташування даного атома необхідно знати обсяг, який він займає. Коли атом розташований в бездефектній частині матеріалу, цей обсяг досить добре визначений, і його можна визначити, наприклад, побудовою полієдрів Вороного. Однак поблизу дефектів, таких як тріщини, поверхня, локальний обсяг погано визначено, і в цих місцях неможливо визначити напруги. На відміну від напруг, величини $\sigma_i^{\alpha\beta} V_i$ завжди однозначно визначені, і, як правило, програми МД виводять значення саме цих величин.

2.2 Розрахунок дифузійних параметрів

2.2.1 Середньоквадратичні відхилення і дифузія

Дифузія відіграє важливу роль у кінетиці багатьох процесів в матеріалах [14]. Експериментальні вимірювання коефіцієнтів дифузії є дорогими, складними і в деяких випадках майже неможливими. Безкоштовний підхід полягає у визначенні параметрів дифузії матеріалу за допомогою атомістичного комп'ютерного моделювання [15]. На додачу до прогнозування коефіцієнтів дифузії, комп'ютерне моделювання може забезпечити розуміння атомних механізмів дифузійних процесів, створюючи фундаментальні основи для стратегій проектування матеріалів за допомогою контролю швидкості дифузії. У даній роботі ми зосереджені на найпростішому випадку самодифузії в металах з метою перевірки різних методів розрахунків дифузії.

Добре встановлено, що самодифузія в металах відбувається завдяки міграції точкових дефектів. Під механізмами точкового дефекту коефіцієнт дифузії D може бути виражений [16]

$$D = a^2 f \gamma v x_e^d \exp\left(-\frac{G_m^d}{k_B T}\right), \quad (2.19)$$

де a – довжина стрибка атомів, є геометричним чинником,

f – коефіцієнт кореляції стрибка,

ν – частота стрибків, яка є того ж порядку що й типових частота атомних коливань,

G_m^d – вільна енергія, пов'язана з бар'єром міграції ,

kT - тепловий коефіцієнт,

x_e^d – рівноважна концентрація точкових дефектів. Останнє пов'язано з вільною енергією утворення точкових дефектів, G_m^d , наступним чином:

$$x_e^d = e^{-\frac{G_m^d}{kT}} \quad (2.20)$$

Вільна енергія ділиться на частини енергії та ентропії за допомогою $G = E - TS$.

Найбільш поширеним підходом до розрахунків дифузії є обчислення всіх точкових дефектних характеристик при $T = 0$ К, а потім застосовувати рівняння. (2.19) та (2.20) для отримання D . Оскільки такі обчислення не вимагають великих комірок моделювання, для прогнозування параметрів дифузії можуть використовуватися перші принципи без будь-яких додатних параметрів із зовні [17]. Однак цей підхід спирається на припущення, що всі параметри в Рівняння (2.19) та (2.20) не залежать від температури. Моделювання молекулярною динамікою (МД) з напівемпіричними міжатомними потенціалами показує, що це припущення не є реалістичним [18–21]: енергія формування дефектів та інші параметри залежать від температури. Ця температурна залежність відображає ангармонічність атомних коливань та інших фізичних ефектів. Оскільки в даний час неможливо обчислити параметри дифузії у твердих тілах безпосередньо з моделювання abinitio MD, деякі температурні поправки необхідно вносити в стаціонарні методи. Одним із можливих способів впровадження таких поправки є використання квазігармонічного (QH) наближення до атомних коливань, яке буде розглянуто в розділі. III. Проте єдиним способом перевірки точності QH наближення є порівняння його прогнозів з будь-якими експериментами (які важкі і можуть бути предметом домішкового ефекту та інших джерел помилок) або більш точними та прямими розрахунками.

Найбільш прямий підхід до обчислень параметрів дифузії пропонує метод класичної молекулярної динаміки. MD автоматично фіксує ангармонічність атомних коливань та всіх інших джерел температурних ефектів. На жаль, дифузія в ґратці в твердих тілах в даний час перевищує часовий масштаб, доступний для моделювання МД, навіть при напівемпіричних потенціалах. Труднощі виникають принаймні з трьох джерел. Перша з них полягає в тому, що швидкість стрибка точкових дефектів у кристалах дуже повільна у порівнянні з типовими показниками стрибка в границях зерен або на відкритих поверхнях. По-друге, для того, щоб створити та точно розрахувати рівноважну концентрацію точкових дефектів, симуляційний блок повинен містити недосконалості та джерела дефектів і, таким чином, мають великий розмір. По-третє, після того як симуляційний блок досягає рівноваги з точковими дефектами, він містить дуже малу кількість точкових дефектів, і вироблення статистично значимих атомних переміщень, викликаних цими дефектами, вимагатиме нереалістично довгого MD часу. У цій роботі ми продемонструємо, що деякі з цих труднощів можна подолати шляхом введення декількох точкових дефектів у блок імітації, обчислення параметрів дифузії, а потім внесення відповідних корекцій для рівноважної концентрації дефекту.

Дійсно, якщо в моделі одночасно присутні декілька точкових дефектів, процес дифузії досить швидкий, щоб ефективно розрахувати ефективну дифузію D^{eff} на один дефект використовують формулу:

$$D^{eff} = \frac{D^{sim}}{x^d} \quad (2.21)$$

Тут x^d – фактична концентрація точкових дефектів, створена в моделі,

$$D^{sim} = \frac{\langle r^2 \rangle}{6t} \quad (2.22)$$

це параметри дифузії, отримані при моделюванні, і $\langle r^2 \rangle$ – середнє квадратичне переміщення атомів протягом часу моделювання t . Істинну дифузію можна потім розрахувати за формулою:

$$D = x_e^d D^{eff} \quad (2.23)$$

знаючи рівноважну концентрацію точкових дефектів x_e .

2.2.2 Розрахунок енергії формування вакансій та рівноважної концентрації вакансій

Об'ємну енергію вакансії можна розрахувати за формулою [22]:

$$E_f = E_v - E_b \frac{N-1}{N}, \quad (2.24)$$

де E_v — усереднена повна енергія системи з вакансією,

E_b — усереднена повна енергія системи без вакансії,

N — кількість атомів в системі без вакансії.

Оскільки флуктуації енергії можуть бути співрозмірними з енергією утворення вакансії потрібно проводити тривалі симуляції для кожного випадку (вакансія наявна і не наявна) по декілька разів з різними ініціалізаціями. Як було вказано раніше симуляції МД детерміновані, але стохастичність досягається ініціалізацією початкових швидкостей з нормального розподілу з різними зернами для генератора випадкових чисел. Для оцінки похибки візьмемо норму 2-го порядку повного диференціалу рівняння (2.11):

$$\Delta E_f = \sqrt{\left(E_b \frac{N-1}{N}\right)^2 + (\Delta E_v)^2} \quad (2.25)$$

Щоб розрахувати рівноважну концентрацію вакансій візьмемо загальноприйняту апроксимацію:

$$x_e^d \approx 3 \exp\left(-\frac{E_f}{k_B T}\right) \quad (2.26)$$

3 ТЕОРЕТИЧНІ ДОСЛІДЖЕННЯ ТА ОБГОВОРЕННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ

3.1 Опис моделей

Для теоретичного дослідження було створено модель розмірами $18 \times 12 \times 12$, з періодичними умовами в 3 напрямках, для 5 температур: 300 К, 500 К, 700 К, 900 К та 1100 К, з напруженнями ($\pm 5\%$) та без напружень, використовувався ансамбль NVT, кількість атомів – 10368. Дослідження проводилось методом молекулярної динаміки з використанням MEAM потенціалу (табл. 3.1) отриманого в роботі [13].

Таблиця 3.1 – Параметри потенціалу

Елемент	Структура ґратки	Число найближчих сусідів	Атомний номер	Атомна маса	Стала ґратки	Енергія на атом	Константи Баскеса							
							b0	b1	b2	b3	t0	t1	t2	t3
Ti	hcp	12,00	1,00	47,88	2,92	4,87	4,25	2,80	2,00	5,00	1,00	3,20	1,44	-4,48

Перевірка потенціалу, шляхом отримання табличних констант (табл.3.2) показала його надійність, розбіжності сягають 0,02 %. В процесі виконання роботи були знайдені рівноважний крок по часу та рівноважні параметри ґратки для 5 температур (табл 3.3)

Таблиця 3.2 – Порівняння розрахованих констант для Ti при 300 K

	Значення отриманні в роботі			Данні отримані з літератури		
	Стала ґратки, a , нм	Коефіцієнт теплового розширення α , $\times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$	Когезивна енергія, e_{coh} , eV/atom	Стала ґратки, a , нм	Коефіцієнт теплового розширення α , $\times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$	Когезивна енергія, e_{coh} , eV/atom
Ti	2,9538	8,5	4,85	2,954[11]	8,3[11]	4,80[11]

Таблиця 3.3 – Рівноважний крок по часу та рівноважні параметри ґратки в залежності від температури

Температура, K	Крок по часу Δt , 10^{-14} c	Параметри ґратки		
		a , Å	c , Å	c/a
300	1,6	2,95380	4,70496	1,59285
500	1,6	2,95936	4,718463	1,59442
700	1,5	2,96469	4,73212	1,59616
900	1,4	2,97039	4,746594	1,59797
1100	1,4	2,97675	4,761312	1,5995

3.2 Параметри об'ємної самодифузії за вакансійним механізмом

3.2.1 Рівноважні параметри ґраток

Модель Ti має ГЦП ґратку, тому для створення моделей потрібно знати значення параметрів ґратки a , c для всіх температур. Були отримані рівноважні параметри a (рис. 3.1), c (рис. 3.2) для ґратки Ti в залежності від температури.

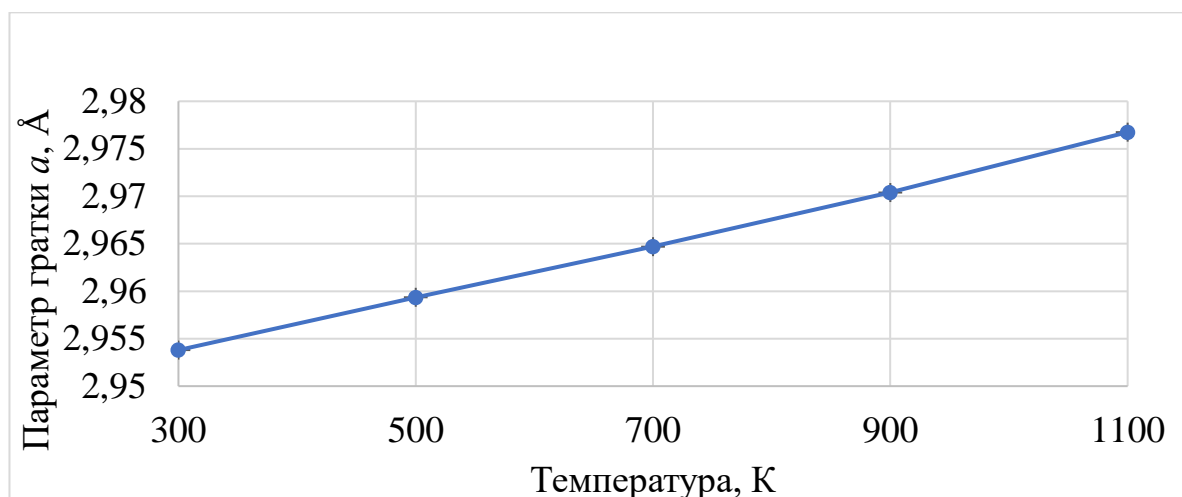


Рисунок 3.1 – Залежність параметра a від температури для ґратки Ті

Та відповідно їх відношення c/a (рис. 3.3) в залежності від температури.

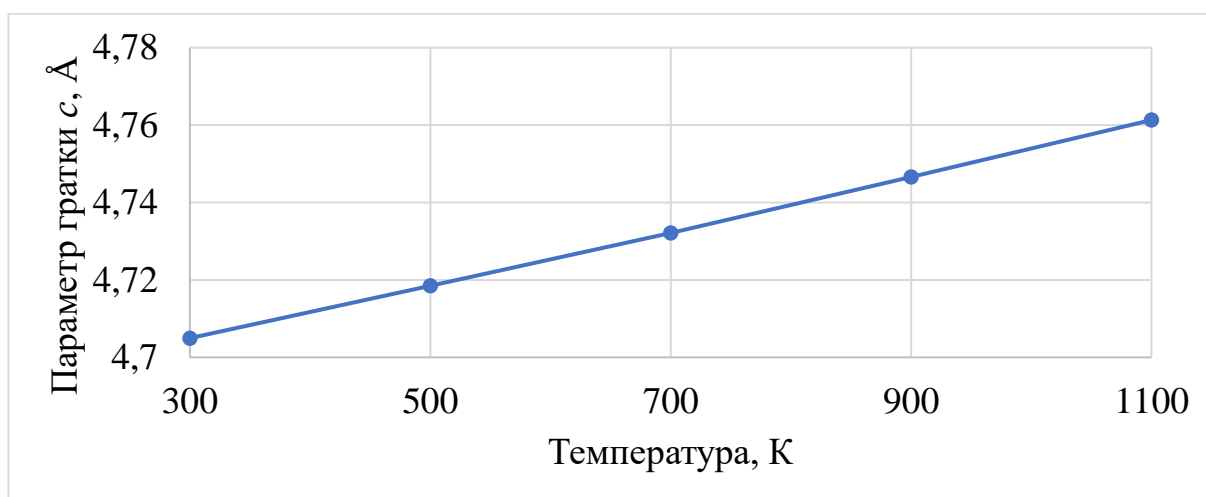


Рисунок 3.2 – Залежність параметра c від температури для ґратки Ті

Як бачимо параметр c з температурою збільшується швидше ніж параметр a , тому відповідно і відношення c/a не є сталим з температурою. Таке явище може призводити до виникнення напружень з підвищенням температури у полікристалічних зразках.

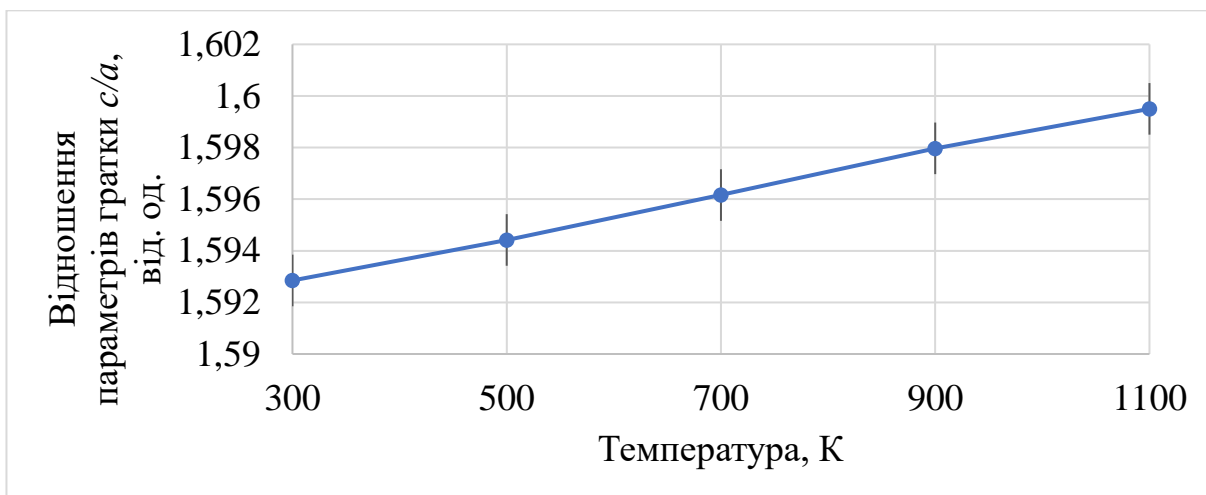


Рисунок 3.3 – Залежність відношення параметрів c/a від температури для ґратки Ti

3.2.2 Рівноважна енергія формування вакансій та рівноважна концентрація вакансій

Значення обрахованих рівноважних енергій формування вакансії в залежності від температури представлені на рис.3.4. Для всіх температур це значення приблизно дорівнює 1,7 еВ.

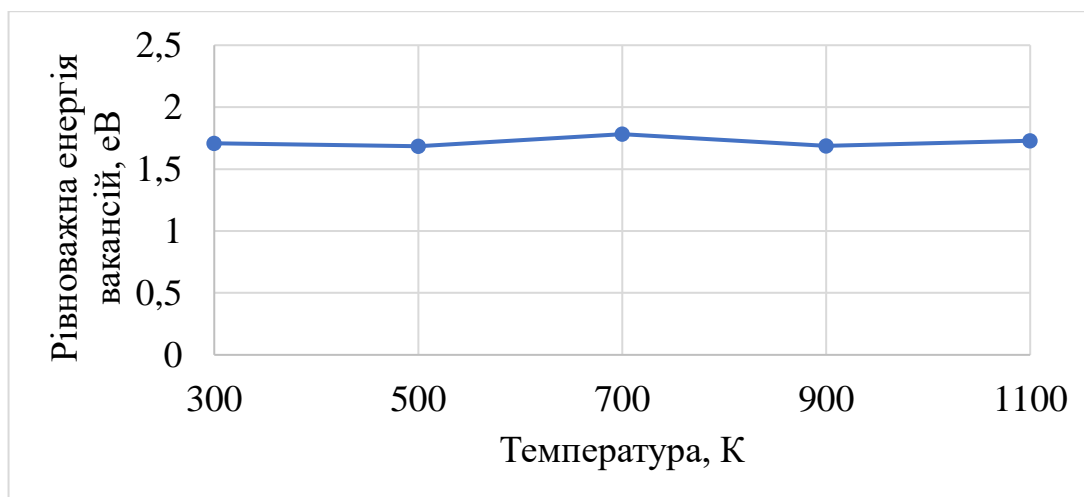


Рисунок 3.4 – Залежність рівноважної енергії вакансій від температури

Використовуючи значення енергії формування вакансій були обраховані рівноважні концентрації вакансій (рис 3.5), як бачимо їх значення не лінійно збільшується від 10^{-28} 1/атом при 300 К, до 10^{-7} 1/атом при 1100 К.

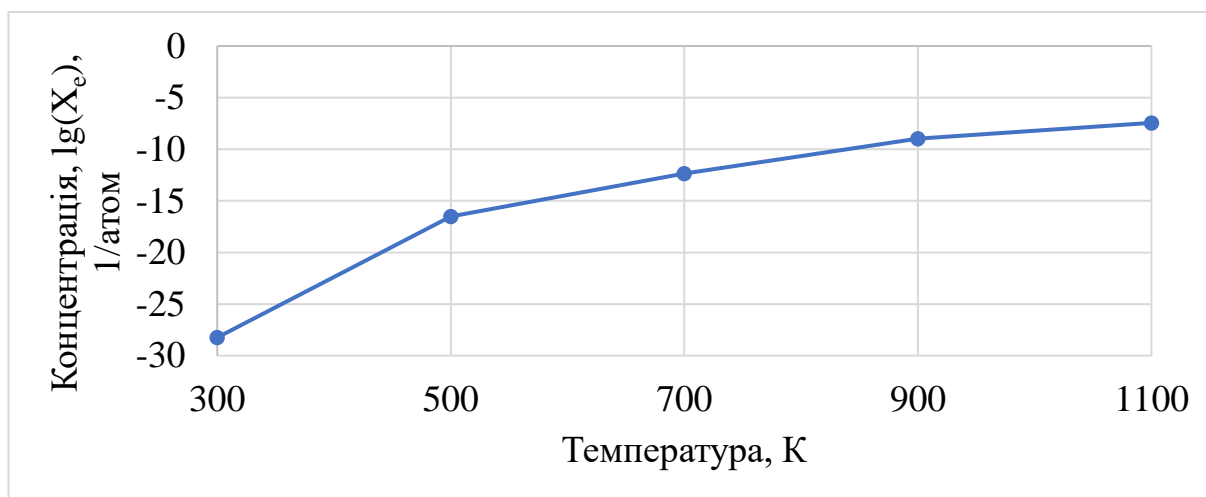


Рисунок 3.5 – Графік Ареніуса для рівноважних концентрацій вакансій

3.2.3 Коефіцієнт дифузії симуляції та реальний коефіцієнт дифузії

При моделюванні атоми, які виходять з розрахункової комірки, як би з'являються через протилежні стінки комірки, тому їх координати відчують великі зміни, хоча атоми змістилися на невелику відстань до сусідньої комірки. Щоб правильно розраховувати зміщення, необхідно врахувати цю особливість.

За визначенням, середньоквадратичне відхилення частинок протягом часу t дорівнює:

$$\langle r^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \|\vec{r}_i(t) - \vec{r}_i(0)\|_2 \quad (3.1)$$

Випадкові переміщення атомів пов'язані з дифузією. Відповідно до рівняння Айнштайна, середньоквадратичне зміщення прямо пропорційне часу:

$$\langle r^2 \rangle = 6Dt \quad (3.2)$$

Коефіцієнт пропорційності D називається коефіцієнтом дифузії. Таким чином, за допомогою МД можна визначити коефіцієнт дифузії симуляції:

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle r^2 \rangle}{6t} \quad (3.3)$$

Після визначення реальних коефіцієнтів дифузії та коефіцієнтів дифузії симуляції був побудований графік залежності коефіцієнта дифузії від температури в координатах Ареніуса (рис.3.6), він має лінійний характер що свідчить про те що коефіцієнти дифузії знайденні вірно.

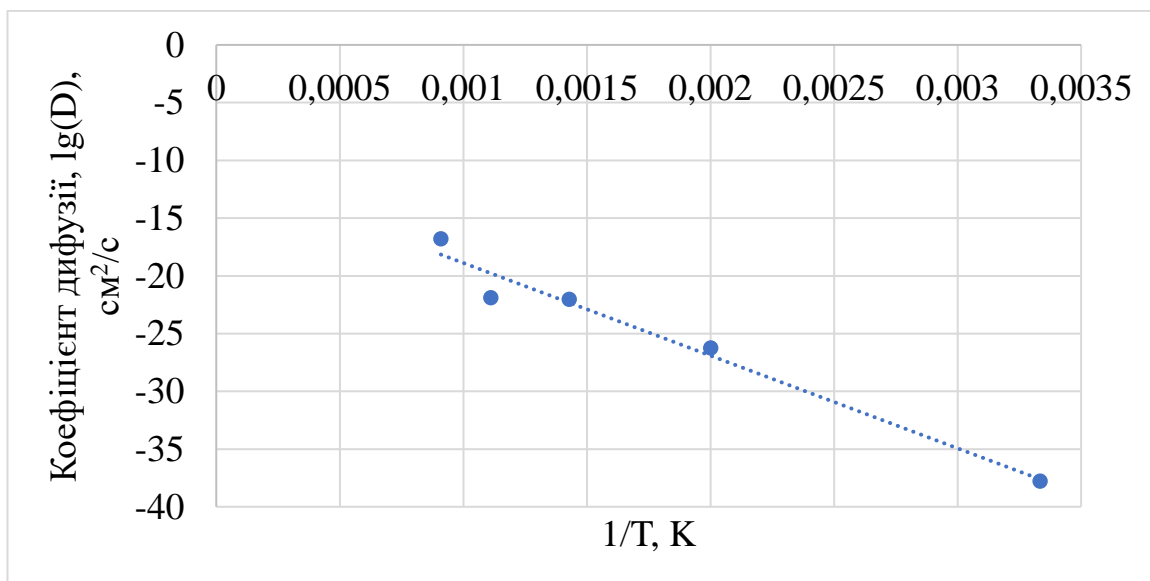


Рисунок 3.6 – Графік Ареніуса для реальний коефіцієнтів дифузій за вакансійним механізмом

3.3 Параметри поверхневої самодифузії ідеальних монокристалів

3.3.1 Напруження в поверхневих шарах Ti внаслідок дії вільної поверхні

Як було визначено раніше що ступінь структурних перетворень в шарах пропорційний напруженням що виникають в цих шарах, тому напруження були визначенні пошарово. Були отриманні значення загальних напружень та їх складових по осях X, Y, Z для 3 площин.

Ti (0001). Напруження для цієї грані спостерігаються в перших 2 площинах та мають осцилюючий характер (рис. 3.7). Найбільше значення загального напруження спостерігається для першої площини і при температурі 1100 K

становить 31000 МПа. Підвищення температури з 300 К до 1100 К не призводить до зміни характеру напружень та їх розподілу по складовим, лише зменшуються абсолютні значення.

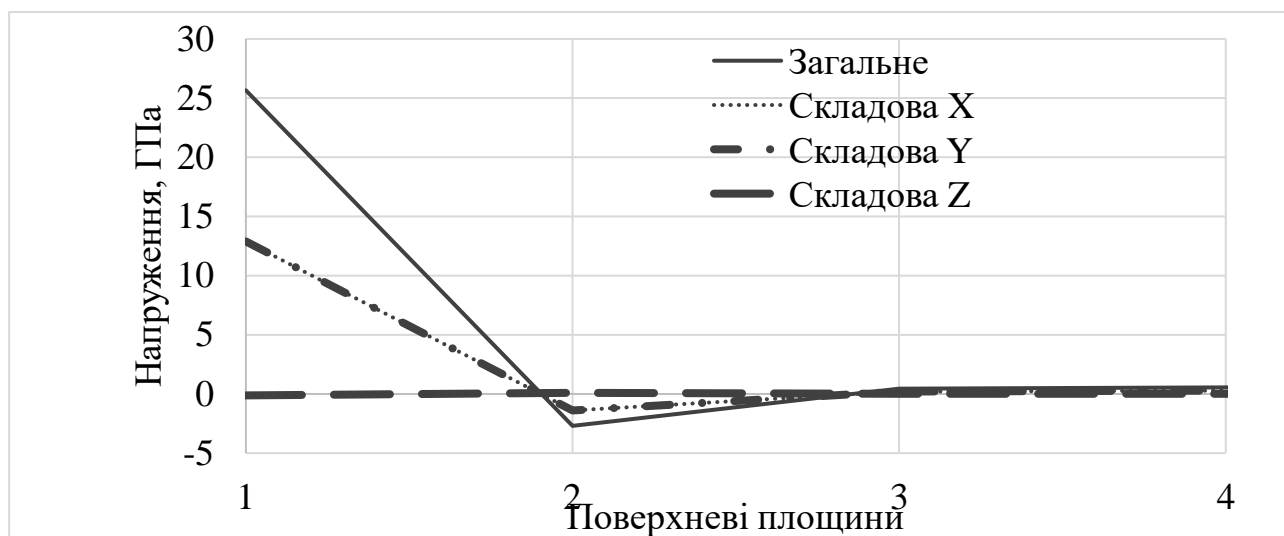


Рисунок 3.7 – Залежності напружень поверхневих шарів для грані (0001) Ті при температурі 300 К

Для температури 500 К глибина впливу вільної поверхні сягає 3 площин (рис.3.8).

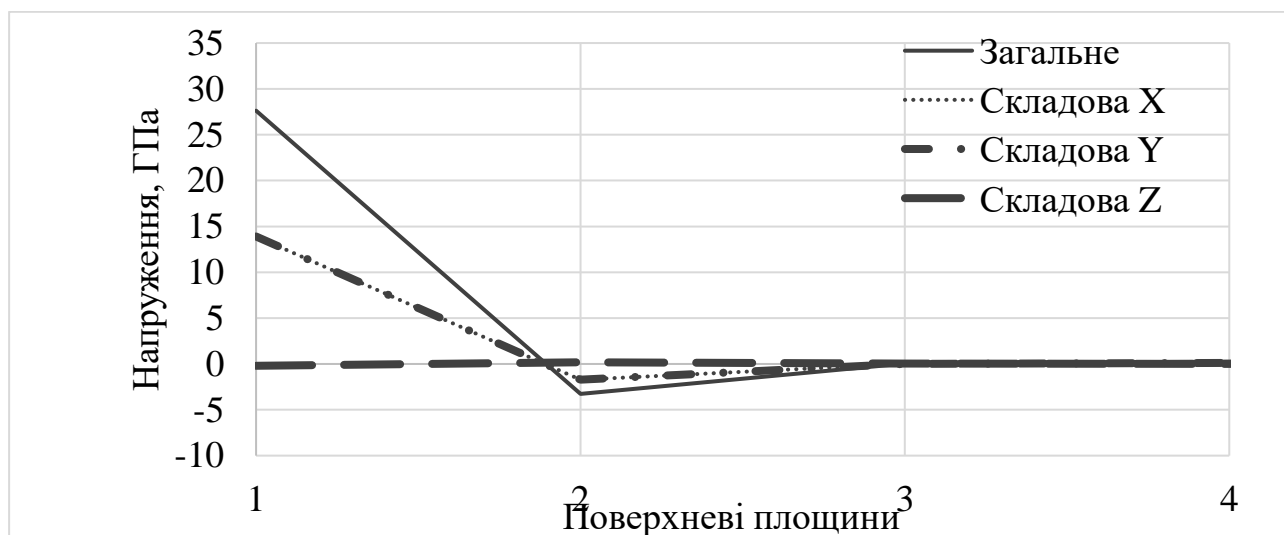


Рисунок 3.8 – Залежності напружень поверхневих шарів для грані (0001) Ті при температурі 500 К

Для температур 700 К та 900 К та грані (0001) глибина впливу вільної поверхні сягає також близько 3 площини (рис.3.9, рис.3.10).

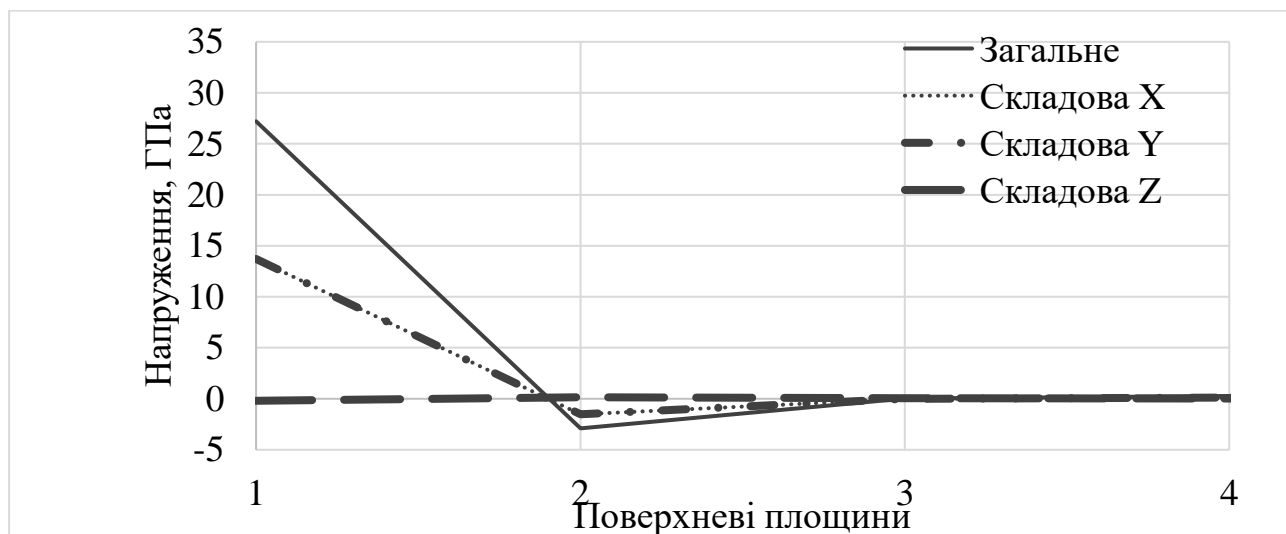


Рисунок 3.9 – Залежності напружень поверхневих шарів для грані (0001) Ті при температурі 700 К

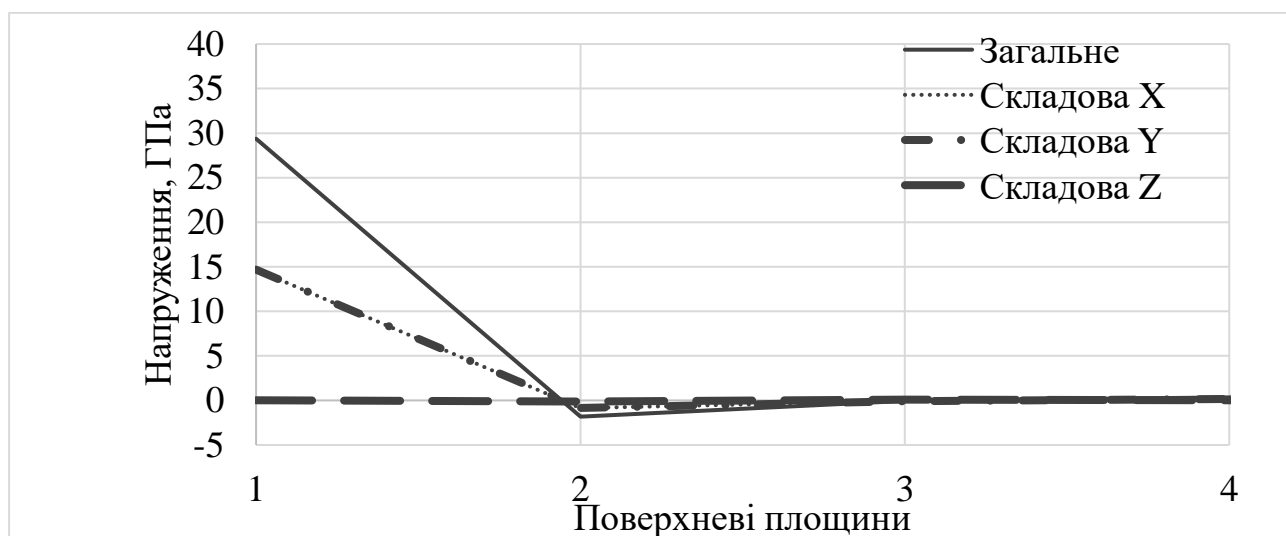


Рисунок 3.10 – Залежності напружень поверхневих шарів для грані (0001) Ті при температурі 900 К

Для температури 1100 К та грані (0001) глибина впливу вільної поверхні сягає близько 2 площини (рис.3.11).

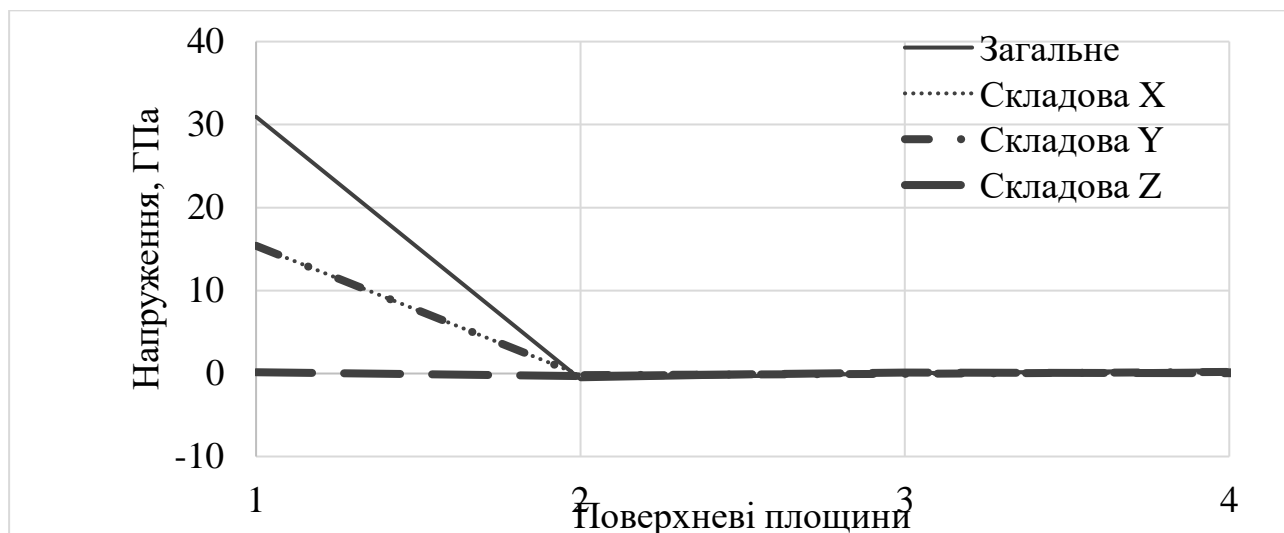


Рисунок 3.11 – Залежності напружень поверхневих шарів для грані (0001) Ті при температурі 1100 К

Ті (1 $\bar{1}$ 00). Зміна напружень в системах для грані (1 $\bar{1}$ 00) Ті спостерігається в перших 4 шарах. Найбільше значення загального напруження спостерігається для другої площини і при температурі 1100 К становить 31000 МПа. Для температури 300 К глибина впливу вільної поверхні сягає близько 3 площин (рис.3.12).

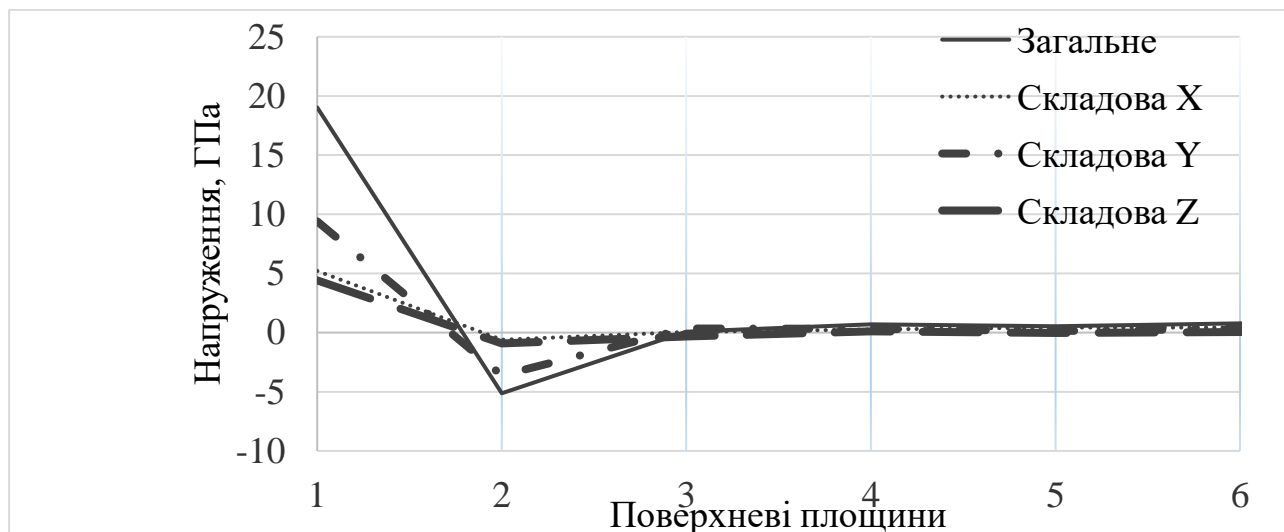


Рисунок 3.12 – Залежності напружень поверхневих шарів для грані (1 $\bar{1}$ 00) Ті при температурі 300 К

Для температури 500 К глибина впливу вільної поверхні сягає близько 3 площин (рис.3.13).

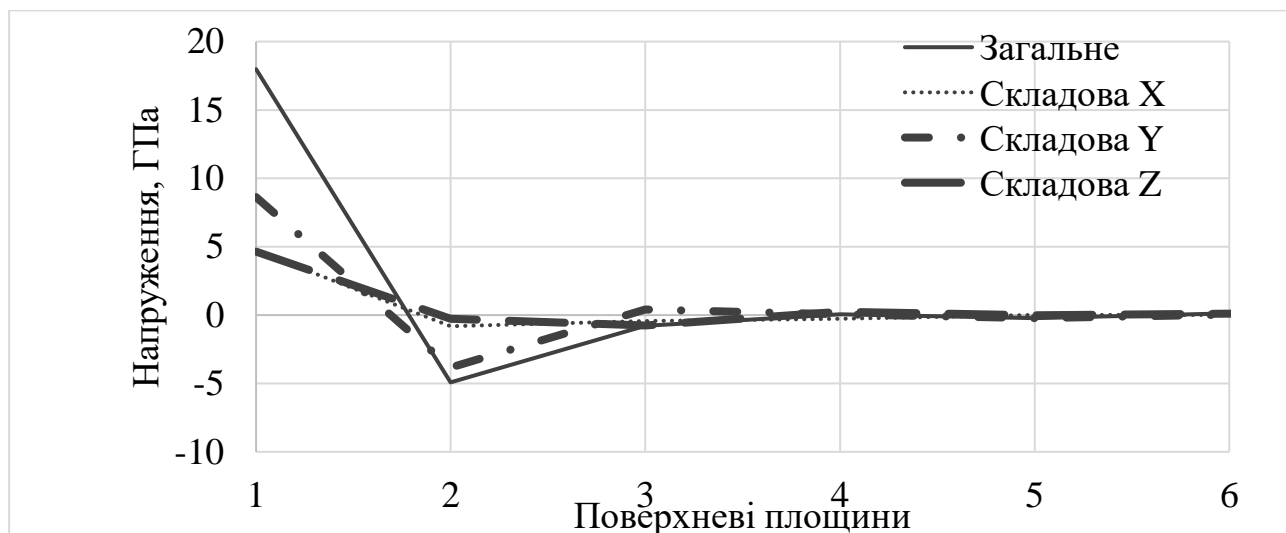


Рисунок 3.13 – Залежності напружень поверхневих шарів для грані (1100) Ті при температурі 500 К

Для температури 700 К глибина впливу вільної поверхні сягає також близько 4 площин (рис.3.14).

Для температури 900 К глибина впливу вільної поверхні сягає близько 5 площин (рис.3.15).

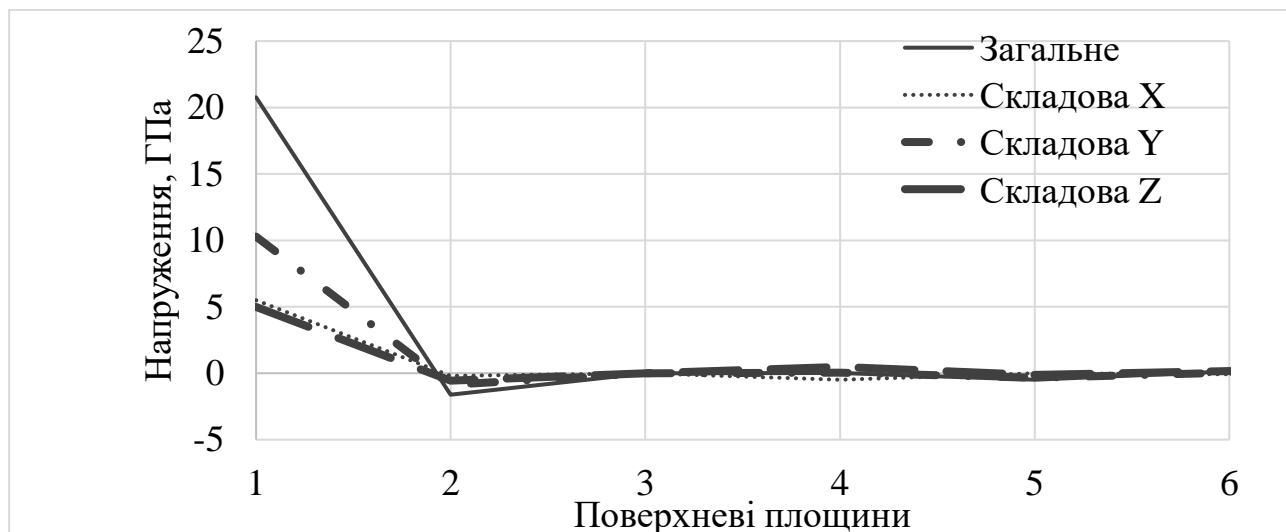


Рисунок 3.14 – Залежності напружень поверхневих шарів для грані (1100) Ті при температурі 700 К

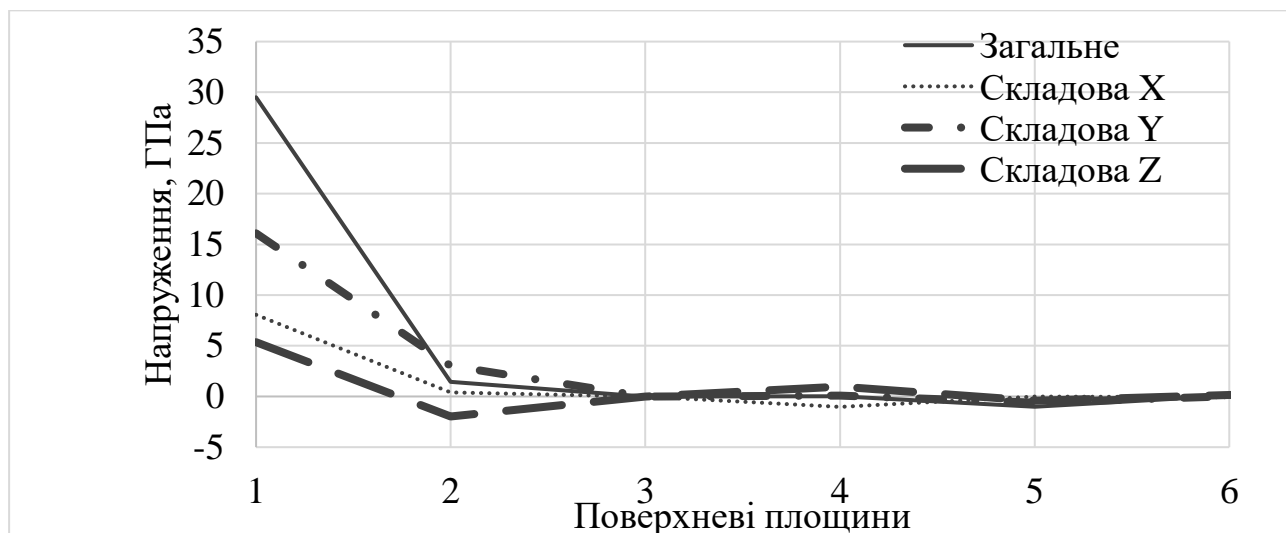


Рисунок 3.15 – Залежності напружень поверхневих шарів для грані $(1\bar{1}00)$ Ti при температурі 900 K

Для температури 1100 K глибина впливу вільної поверхні сягає близько 5 площин (рис.3.16).

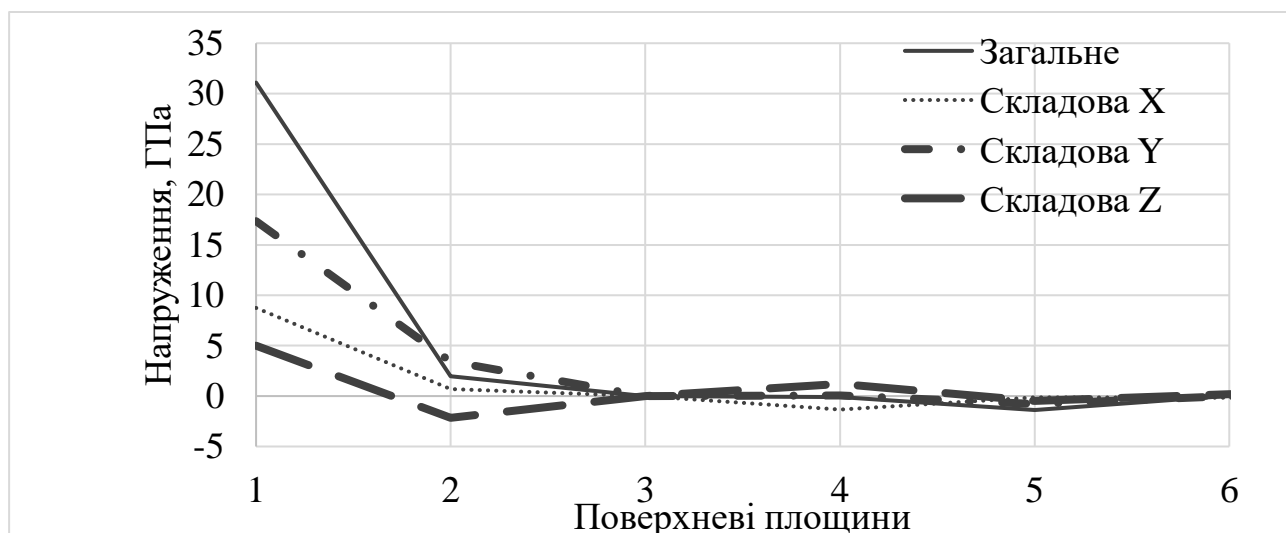


Рисунок 3.16 – Залежності напружень поверхневих шарів для грані $(1\bar{1}00)$ Ti при температурі 1100 K

Ti $(11\bar{2}0)$. Напруження для даної грані є найменшими з трьох розглянутих нами систем і становить для першого шару близько 9000 МПа при температурі

300 К (рис. 3.17). Це можна пояснити найменшою щільністю пакування граней. Для температури 300 К глибина впливу вільної поверхні сягає близько 3 площин.

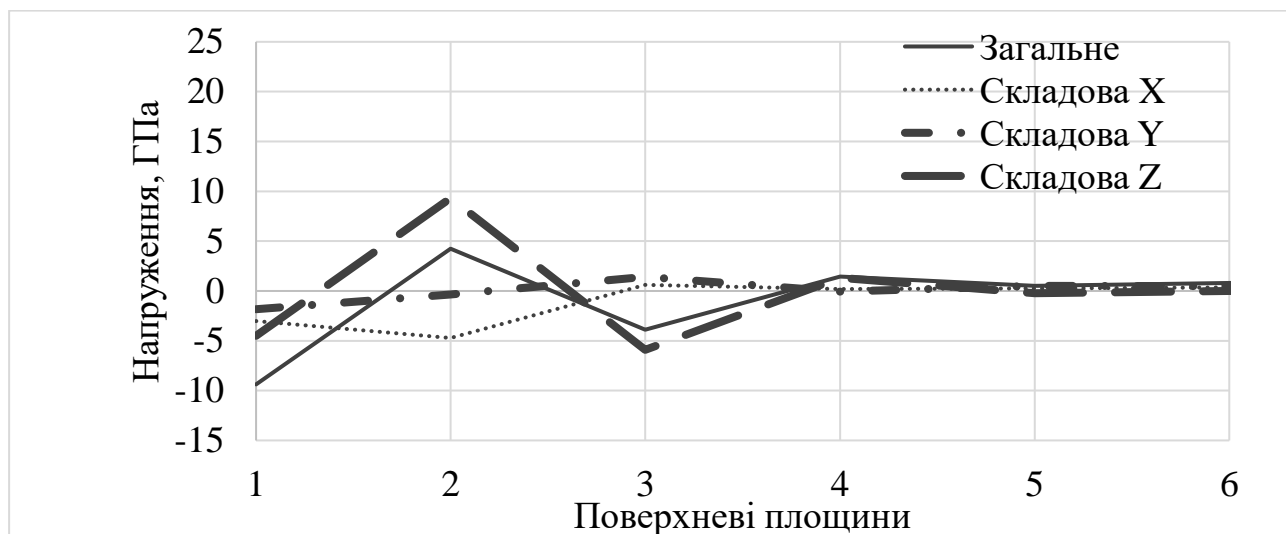


Рисунок 3.17 – Залежності напружень поверхневих шарів для грані $(11\bar{2}0)$ Ті при температурі 300 К

Для температури 500 К та грані $(11\bar{2}0)$ глибина впливу вільної поверхні сягає також близько 4 площин (рис.3.18).

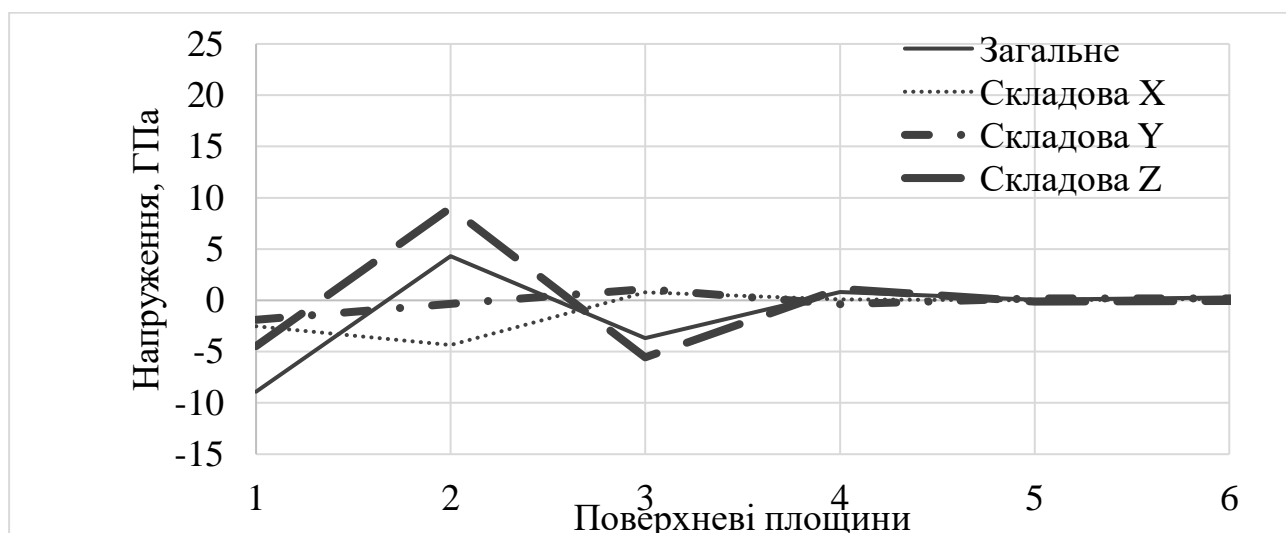


Рисунок 3.18 – Залежності напружень поверхневих шарів для грані $(11\bar{2}0)$ Ті при температурі 500 К

Для температури 700 К глибина впливу вільної поверхні сягає близько 3 площин (рис.3.19).

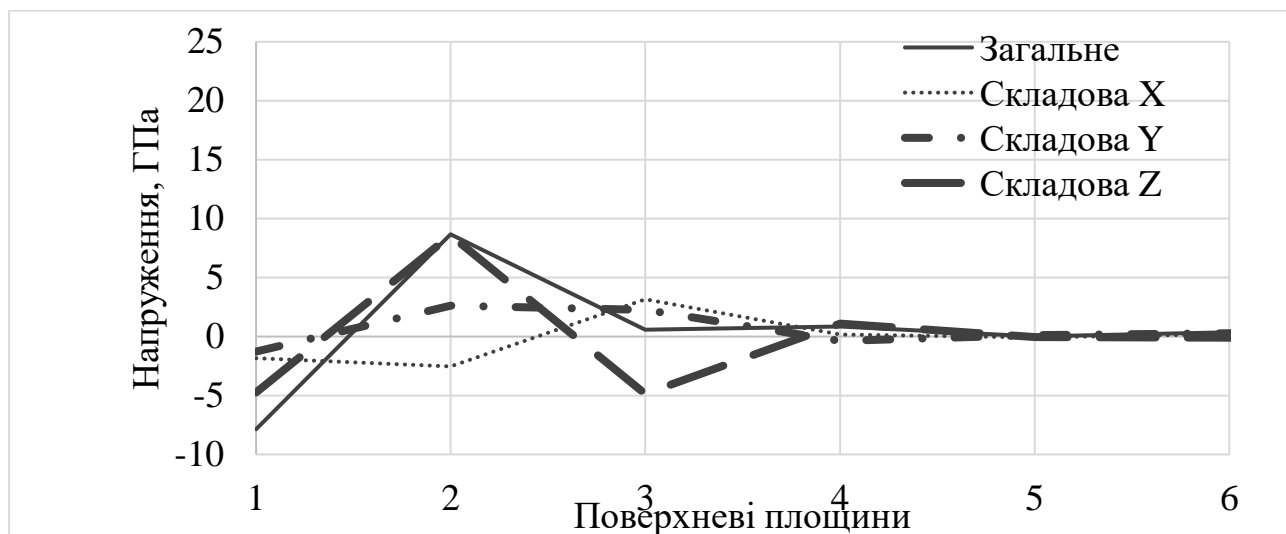


Рисунок 3.19 – Залежності напружень поверхневих шарів для грані $(11\bar{2}0)$ Ті при температурі 700 К

Для температури 900 К та грані $(11\bar{2}0)$ глибина впливу вільної поверхні сягає близько 4 площин (рис. 3.20).

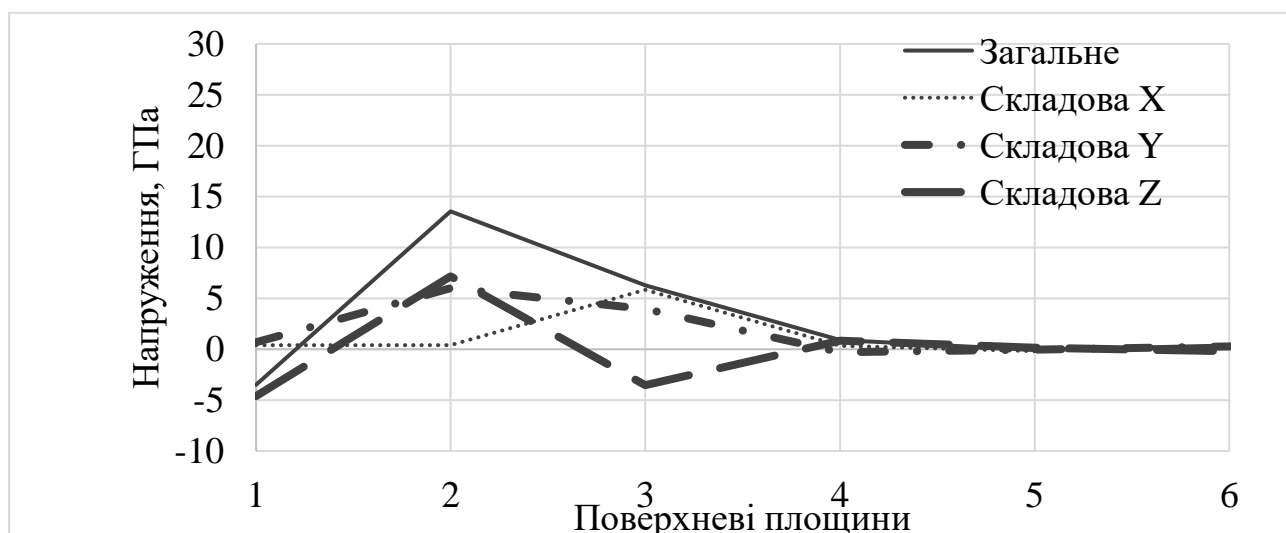


Рисунок 3.20 – Залежності напружень поверхневих шарів для грані $(11\bar{2}0)$ Ті при температурі 900 К

Для температури 1100 К глибина впливу вільної поверхні сягає близько 5 площин (рис. 3.21).

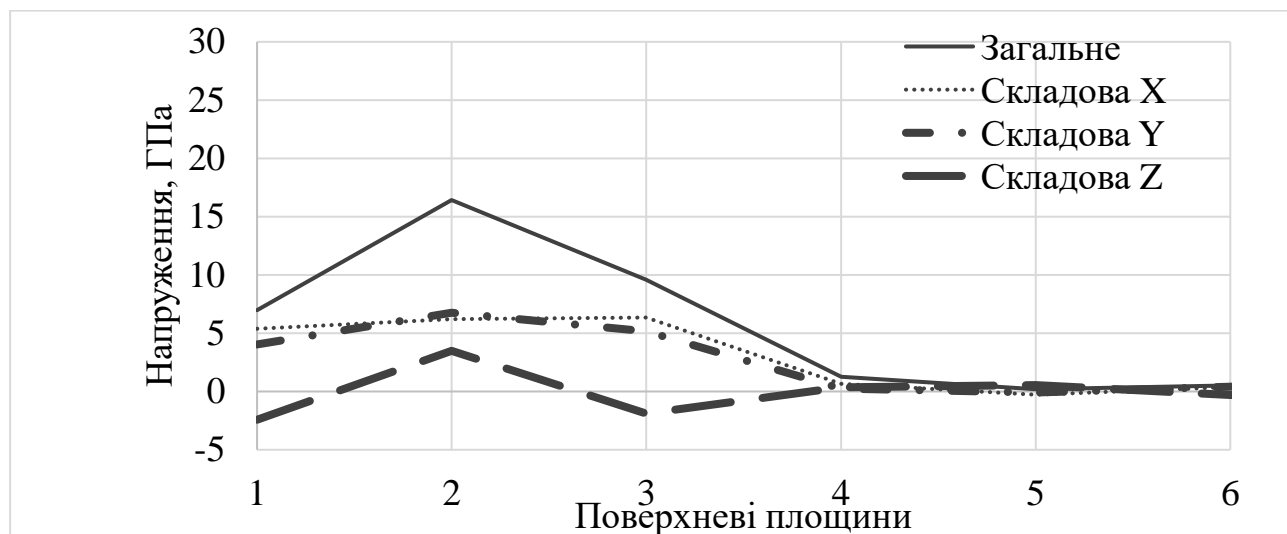


Рисунок 3.21 – Залежності напружень поверхневих шарів для грані $(11\bar{2}0)$ Ті при температурі 1100 К

Чим більша щільність – тим більші загальні напруження, складові X та Y напружень, і тим менша складова Z напружень (табл. 3.4).

Таблиця 3.4 – Напруження в системах (0001) , $(1\bar{1}00)$, $(11\bar{2}0)$ Ті при температурах 300 К, 500 К, 700 К, 900 К, 1100К.

Номер моделі	Температура, К	Орієнтація верхнього шару Ті	Напруження, МПа $\pm 0,5$			
			Загальне	Складові X	Складові Y	Складові Z
№	1	2	3	4	5	6
1	300	(0001)	-416,1	-590,3	-590,5	-67,5
2	300	$(1\bar{1}00)$	-353,5	-410,7	-534,3	-115,7
3	300	$(11\bar{2}0)$	-238,8	-131,2	-310,4	-274,7

Продовження таблиці 3.4

№	1	2	3	4	5	6
4	500	(0001)	-406,8	-563,1	-562,5	-97,7
5	500	(1 $\bar{1}$ 00)	-329,3	-344,5	-494,2	-149,1
6	500	(11 $\bar{2}$ 0)	-230,3	-127,3	-275,9	-287,9
7	700	(0001)	-459,9	-617,5	-616,5	-145,7
8	700	(1 $\bar{1}$ 00)	-407,0	-441,0	-585,2	-194,7
9	700	(11 $\bar{2}$ 0)	-327,0	-260,9	-415,7	-304,4
10	900	(0001)	-536,5	-704,9	-705,5	-199,1
11	900	(1 $\bar{1}$ 00)	-515,1	-576,2	-727,0	-242,1
12	900	(11 $\bar{2}$ 0)	-467,5	-454,1	-617,9	-330,5
13	1100	(0001)	-612,3	-791,3	-790,1	-255,5
14	1100	(1 $\bar{1}$ 00)	-594,8	-677,5	-813,8	-293,1
15	1100	(11 $\bar{2}$ 0)	-617,9	-707,5	-785,4	-360,8

Максимальне напруження зафіксовано в системі з гранню (1 $\bar{1}$ 00)Ті і воно складає приблизно 31000 МПа, мінімальні напруження – в системі з гранню (11 $\bar{2}$ 0) Ті зі значенням 6000 МПа обидва зі знаком плюс (розширюючі напруження).

3.3.2 Залежність енергії формування вакансії та концентрації вакансій в Ті від напружень

Об'ємна енергія вакансій для системи без напружень та з від'ємними напруженнями майже однакова, проте для системи з додатніми напруженнями що є розтягуючими напруженнями енергія вакансій є майже на 1.5 еВ меншою (рис.3.22).

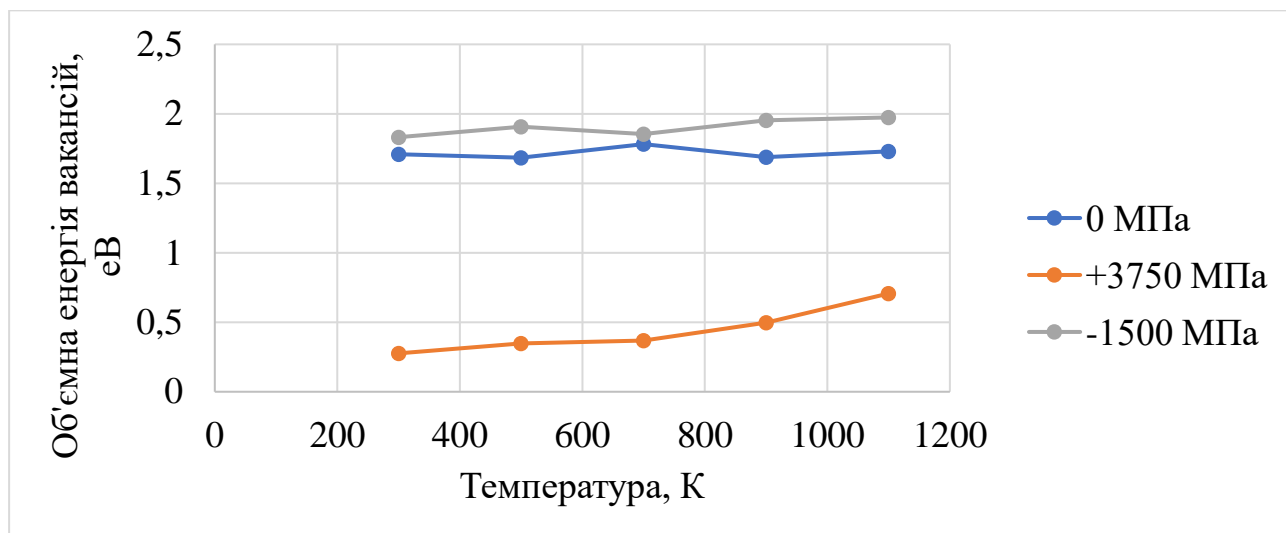


Рисунок 3.22 – Залежність енергії формування вакансії від температури та напруження

Як видно з (рис.3.23) різниця між додатними напруженнями та нульовими відносно концентрація вакансій для температури 300 К сягає 24 порядку. Для температури 500 К ця різниця дещо менша и складає 13 порядку, як ми можемо спостерігати така закономірність спостерігається для інших температур 700 К, 900 К та 1100 К і складає 10, 6, та 5 порядків відповідно, що свідчить про розширюючі напруження. Різниця між від'ємними напруженнями та нульовими не суттєва.

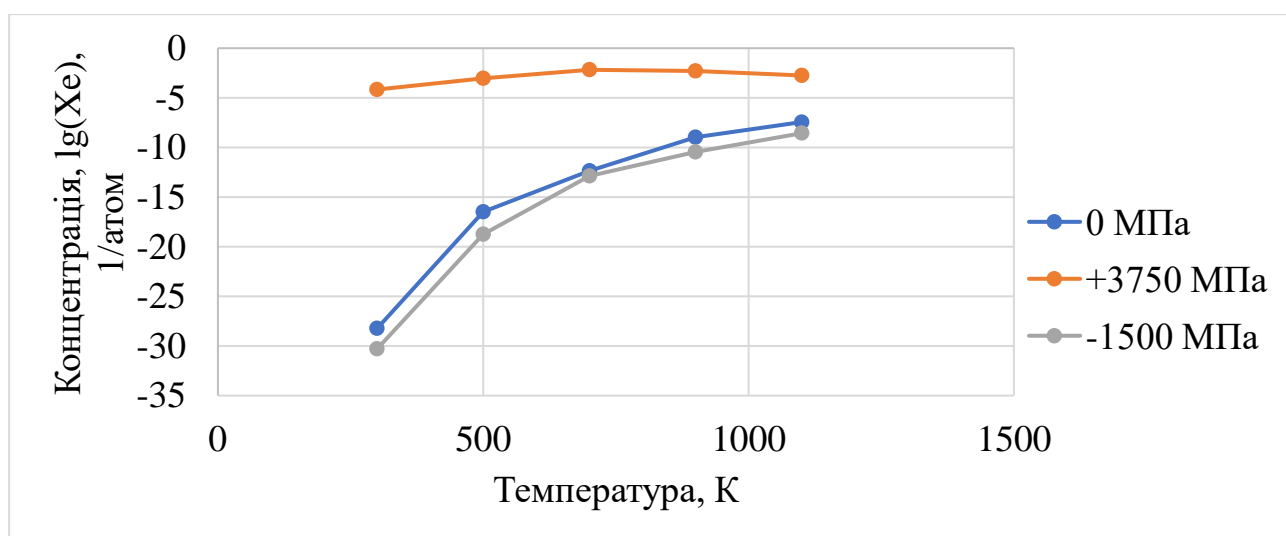


Рисунок 3.23 – Залежність рівноважних концентрацій вакансій від температури в координатах Ареніуса

3.3.3 Залежність параметрів дифузії від напружень

Як видно з (рис.3.24) різниця між додатними напруженнями та нульовими відносно коефіцієнту дифузії для температури 300 К сягає 23 порядку.

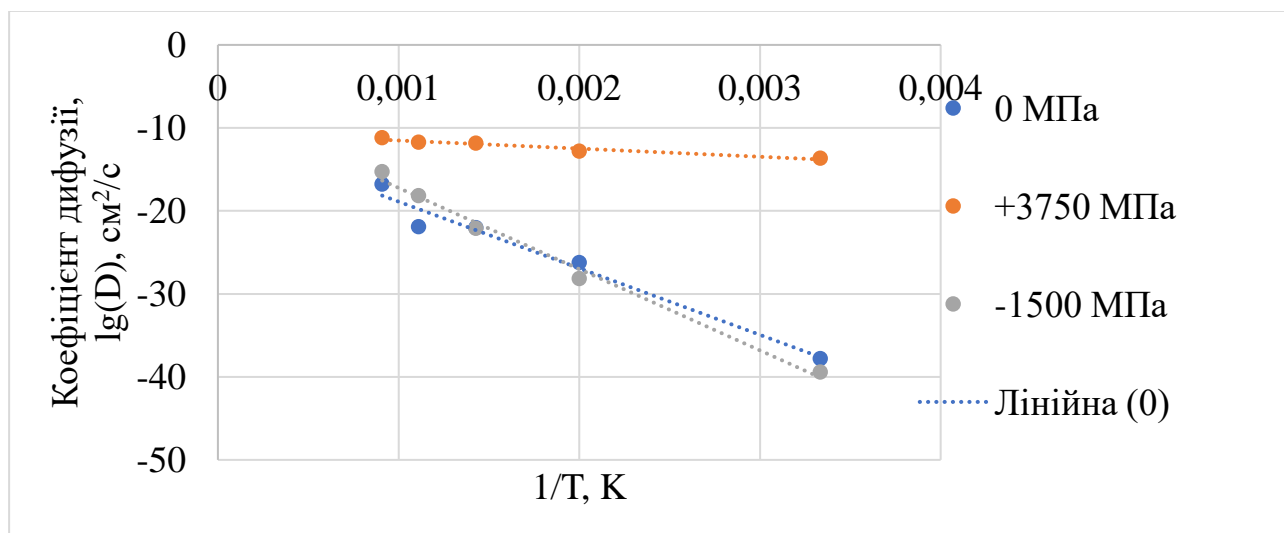


Рисунок 3.24 – Залежність істинного коефіцієнта дифузії за вакансійним механізмом від температури в координатах Ареніуса

Для температури 500 К ця різниця дещо менша и складає 12 порядку, як ми можемо спостерігати така закономірність спостерігається для інших температур 700 К, 900 К та 1100 К і складає 9, 5, та 4 порядки відповідно, що свідчить про розширюючі напруження.

3.3.4 Параметри поверхневої самодифузії титану

Вільна поверхня монокристалу титану призводить до виникнення структурних недосконалостей кристалічної ґратки в поверхневих шарах, а ступінь структурних недосконалостей пропорційна напруженням. Напруження (структурні недосконалості) залежать від орієнтації поверхневих площин та температури. Напруження в кристалічній ґратці призводять до зміни енергії формування вакансій, а також їх рівноважних концентрацій, що відповідно

впливає на коефіцієнт дифузії. Оскільки напруження, викликані дією вільної поверхні, різні в різних напрямках, то і коефіцієнт дифузії в цих напрямках буде різним.

Ti (0001). Для даної грані напруження викликані вільної поверхнею характерні тільки для першої площини (рис. 3.25). Відповідно і дифузійні параметри будуть істотно відрізнятися від об'ємних тільки для першої площини. Коефіцієнт дифузії в об'ємі змінюється від 10^{-37} см²/с при 300 К до 10^{-18} см²/с при 1100 К. При цьому в першому поверхневому шарі він змінюється від 10^{-19} см²/с при 300 К до 10^{-11} см²/с при 1100 К. Із аналізу складових напружень бачимо що напруження по осі Z досить малі, в деяких випадках майже відсутні, а по осям X та Y мають найбільші значення, з чого ми робимо висновок, що дифузія в цій площині буде переважати в паралельним поверхні напрямкам.

Ti (1120). Для даної грані напруження викликані вільної поверхнею характерні для перших трьох площин. Відповідно і дифузійні параметри будуть істотно відрізнятися від об'ємних тільки для перших 3 площин. Найбільші зміни в першому поверхневому шарі, коефіцієнт дифузії тут змінюється від 10^{-44} см²/с при 300 К до 10^{-14} см²/с при 1100 К. Із аналізу складових напружень бачимо що напруження по всім осям мають певні значення, з чого ми робимо висновок, що дифузія в цій площині буде направлена по всім напрямкам.

Ti (1100). Для даної грані напруження викликані вільної поверхнею характерні для перших двох площин. Відповідно і дифузійні параметри будуть істотно відрізнятися від об'ємних тільки для першої площини. Коефіцієнт дифузії в об'ємі змінюється від 10^{-37} см²/с при 300 К до 10^{-18} см²/с при 1100 К. При цьому в першому поверхневому шарі він змінюється від 10^{-23} см²/с при 300 К до 10^{-11} см²/с при 1100 К. Із аналізу складових напружень бачимо що напруження по всім осям мають певні значення, з чого ми робимо висновок, що дифузія в цій площині буде направлена по всім напрямкам.

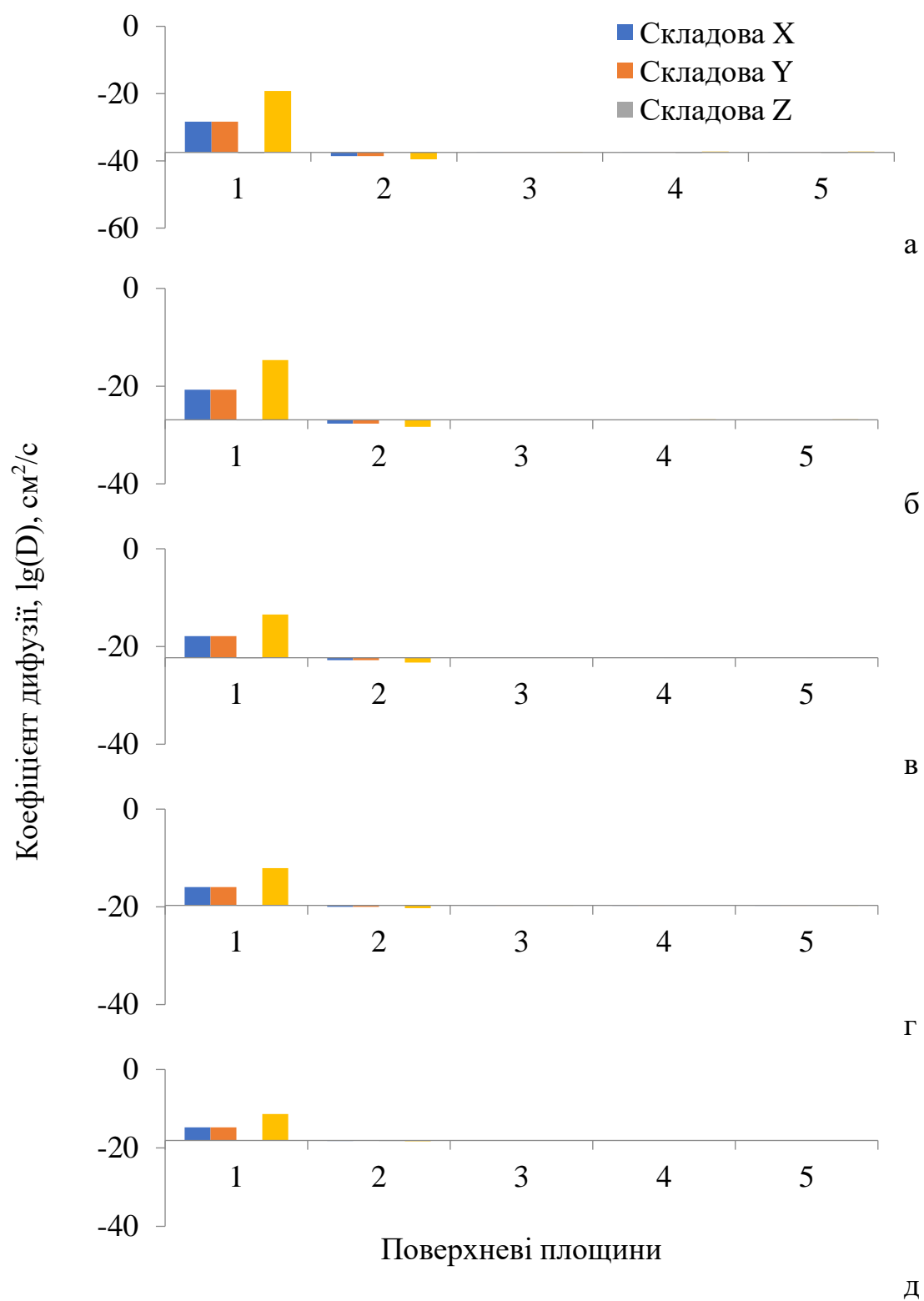
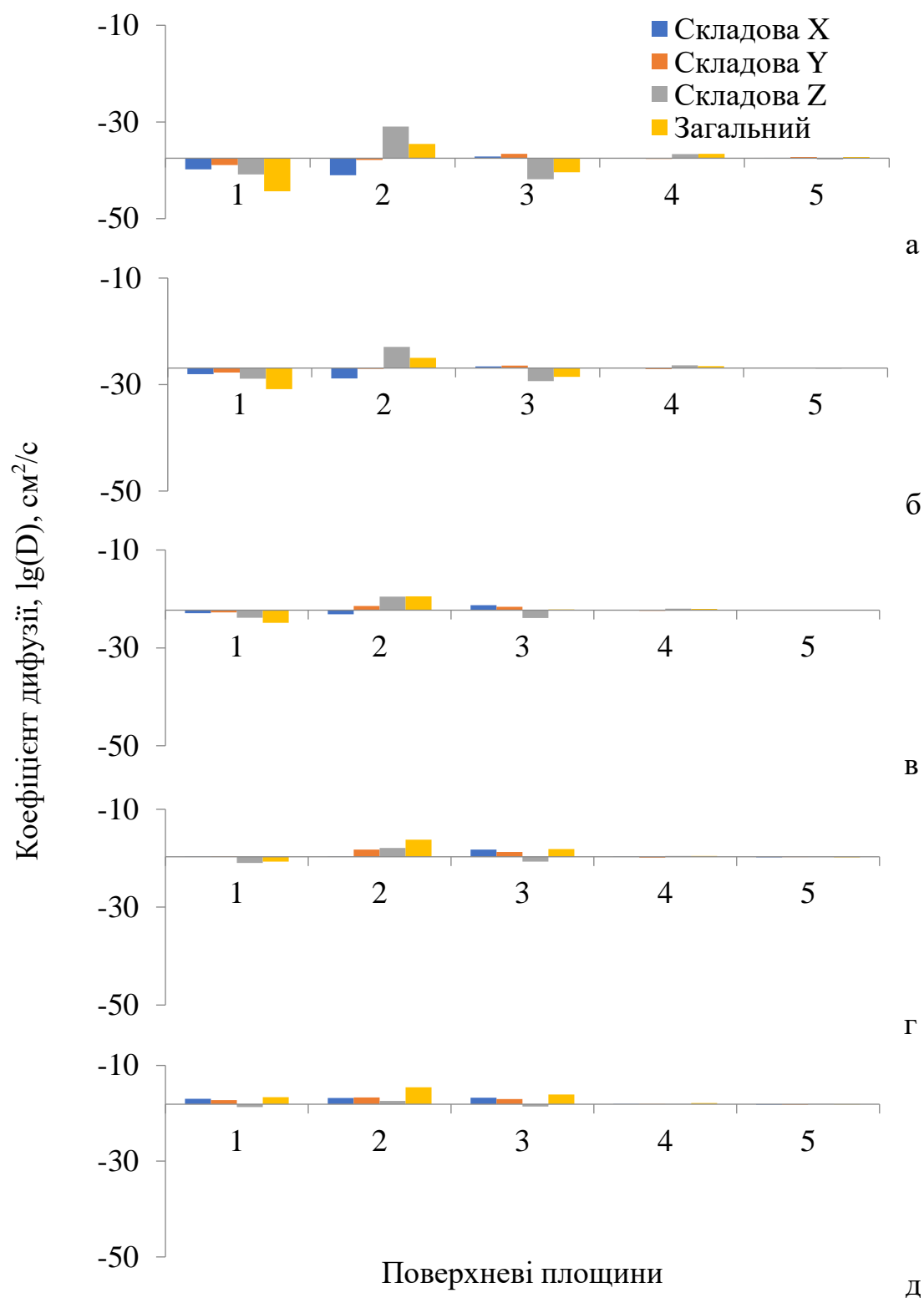


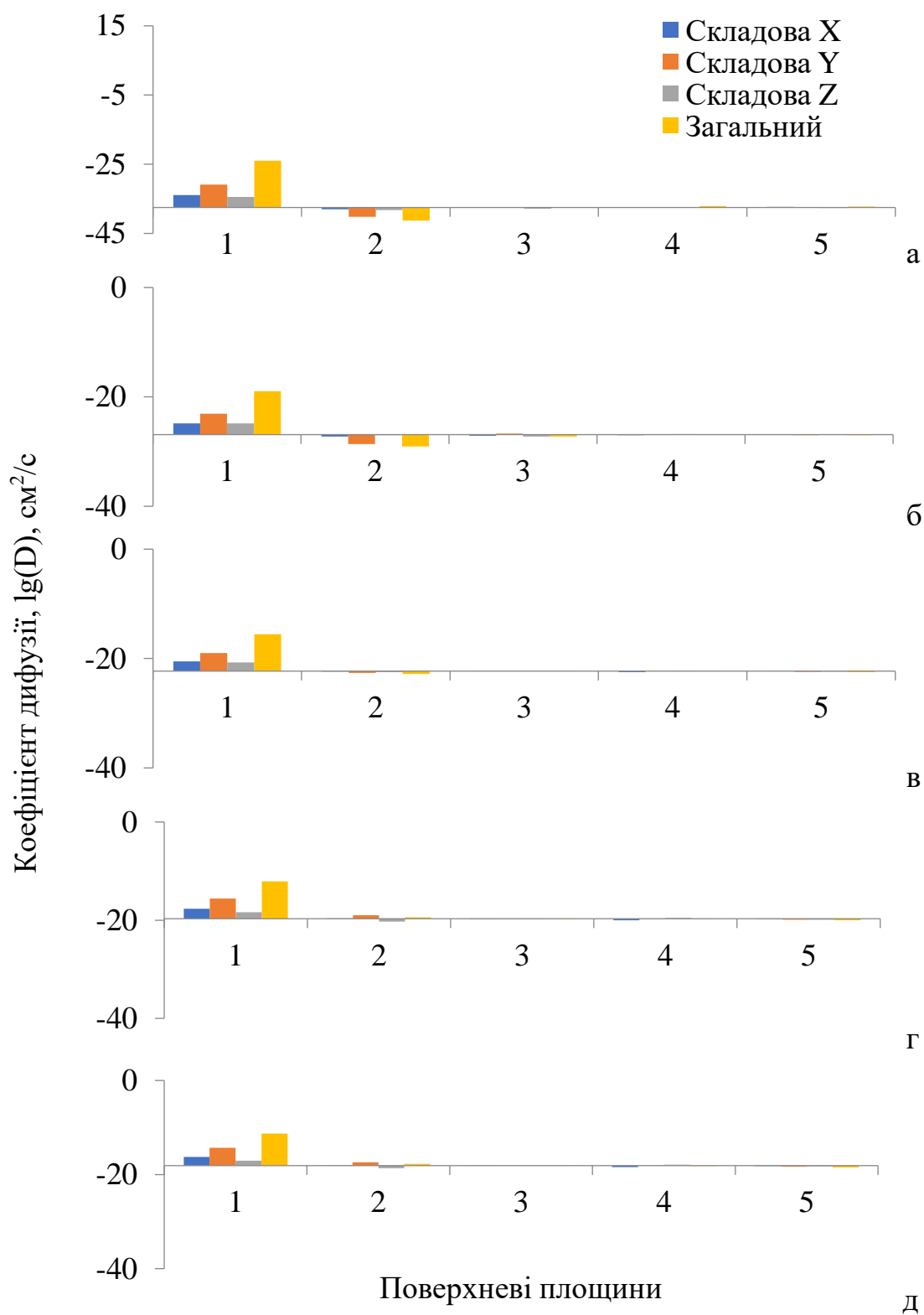
Рис. 3.25 Відхилення значень ступеню коефіцієнту дифузії для поверхневих площин Ti (0001)

Було визначено відхилення значень ступеню коефіцієнту дифузії для площин $Ti(11\bar{2}0)$ (рис. 3.26).



а – 300 К; б – 500 К; в – 700 К; г – 900 К; д – 1100 К
Рис. 3.26 Відхилення значень ступеню коефіцієнту дифузії для поверхневих площин $Ti(11\bar{2}0)$

Було визначено відхилення значень ступеню коефіцієнту дифузії для площин $Ti(1\bar{1}00)$ (рис. 3.27).



а – 300 К; б – 500 К; в – 700 К; г – 900 К; д – 1100 К
Рис. 3.27 Відхилення значень ступеню коефіцієнту дифузії для поверхневих площин $Ti(1\bar{1}00)$

3.4 Висновки до розділу 3

- 1) . Коефіцієнт дифузії в об'ємі змінюється від 10^{-37} см²/с при 300 К до 10^{-18} см²/с при 1100 К.
- 2) Для грані титану (0001) глибина впливу становить 1 атомну площину. Для 300 К коефіцієнт дифузії в цій площині на 12 порядків вище, ніж в об'ємі, і становить 10^{-25} см²/с, при 1100 К на 7 порядків вище, ніж в об'ємі, і становить 10^{-11} см²/с.
- 3) Для грані титану (1 $\bar{1}$ 00) глибина впливу становить 2 атомні площини. Для 300 К коефіцієнт дифузії в першій площині на 14 порядків вище, ніж в об'ємі, і становить 10^{-23} см²/с, при 1100 К на 7 порядків вище, ніж в об'ємі, і становить 10^{-11} см²/с.
- 4) Для грані титану (11 $\bar{2}$ 0) глибина впливу становить 3 атомні площини. Для 300 К коефіцієнт дифузії в першій площині на 7 порядків менше, ніж в об'ємі, і становить 10^{-44} см²/с, при 1100 К на 4 порядків вище, ніж в об'ємі, і становить 10^{-14} см²/с.

4 РОЗРОБКА СТАРТАП-ПРОЕКТУ

Стартап як форма малого ризикового (венчурного) підприємництва впродовж останнього десятиліття набула широкого розповсюдження у світі через зниження бар'єрів входу в ринок, і вважається однією із наріжних складових інноваційної економіки, оскільки за рахунок мобільності, гнучкості та великої кількості стартап-проектів загальна маса інноваційних ідей зростає.

4.1 Зміст ідеї стартапу

Метою розділу є формування інноваційного мислення, підприємницького духу та формування здатностей щодо оцінювання ринкових перспектив і можливостей комерціалізації основних науково-технічних розробок, сформованих у попередній частині магістерської дисертації у вигляді розроблення концепції стартап-проекту в умовах висококонкурентної ринкової економіки глобалізаційних процесів (табл.4.1).

Таблиця 4.1 – Опис ідеї стартап-проекту

Зміст ідеї	Напрями застосування	Вигоди для користувача
Створення бази даних параметрів самодифузії для титану в залежності від температури, напружень, відстані від поверхні, з метою використання її для підбору технологічних параметрів виготовлення та експлуатації нанорозмірних пристроїв.	Наукові дослідження сплавів на основі титану	Економія від зменшення кількості експериментальних досліджень необхідних для підбору технологічних параметрів
	Літакобудування, машинобудування	Економія від зменшення кількості експериментальних досліджень необхідних для підбору технологічних параметрів

Визначення сильних, слабких та нейтральних характеристик ідеї проекту наведено в таблиці 4.2.

Таблиця 4.2 – Визначення сильних, слабких та нейтральних характеристик ідеї проекту

№	Техніко-економічні характеристики ідеї	Товари/концепції конкурентів			W	N	S
		Мій проект	ТОВ «ТитанГруп»	Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова			
1.	Параметр самодифузії	Параметр самодифузії тільки для нанорозмірної системи, при ідеальній безпримісній поверхні	Неповна відповідність умовам реальної моделі	Складність проведення експерименту	+		
2	Ціна	Малі енерговитрати через дослідження на персональному комп'ютері	Великі енерговитрати через дослідження на супер комп'ютері	Велика кількість досліджень			+

Примітка: W - слабка сторона, N - нейтральна сторона, S - сильна сторона.

За рахунок малих енерговитрати для персонального комп'ютера, ідея проекту матиме підґрунтя для формування конкурентоспроможності.

Технологічна здійсненність проекту наведена в таблиці 4.3

Характеристика потенційних клієнтів стартап проекту наведено в таблиці 4.4.

Таблиця 4.3 – Технологічна здійсненність ідеї проекту

№ п/п	Ідея проекту	Технології її реалізації	Наявність технологій	Доступність технологій
1	Створення бази даних параметрів самодифузії	За допомогою комп'ютерного моделювання.	Технологія наявна, добре вивчена та апробована	Доступне
Обрана технологія реалізації ідеї проекту: Можлива реалізація технологій ідеї, при необхідному обсязі інвестицій.				

Таблиця 4.4 – Характеристика потенційних клієнтів стартап проекту.

№ п/п	Потреба, що формує ринок	Цільова аудиторія (цільові сегменти ринку)	Відмінності у поведінці різних потенційних цільових груп клієнтів	Вимоги споживачів до товару
1	Готові бази даних з параметрами самодифузії	Наукові інститути, авіабудування, машинобудування	За рахунок великих інвестицій авіабудування буде потребувати найбільшої наповненості для відповідних баз даних	Наявність параметрів самодифузії для титану в залежності від температури, напружень.

Заключним етапом ринкового аналізу можливостей впровадження проекту є складання SWOT-аналізу (матриці аналізу сильних (Strength) та слабких (Weak) сторін, загроз (Troubles) та можливостей (Opportunities) який наведений в таблиці 4.5.

Таблиця 4.5 – SWOT- аналіз стартап-проекту

<p>Сильні сторони:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Наявність великої кількості інформації щодо параметрів самодифузії та малі енерговитрати 	<p>Слабкі сторони:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Вузька область застосування, • Параметри самодифузії розраховані лише для титану
<p>Можливості:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Розробка нових, модернізованих технологій виробництва, • Розвиток альтернативних джерел енергії • розвиток авіа- та машинобудування які є постійними споживачами 	<p>Загрози:</p> <ul style="list-style-type: none"> • відсутність висококваліфікованих працівників, • політична та економічна криза в країні, відсутність інвестицій в авіа- та машинобудування.

4.2 Висновки до розділу 4

1. Аналіз ринкової спроможності стартап-проекту «Створення бази даних параметрів самодифузії для титану в залежності від температури, напружень, відстані від поверхні, з метою використання її для підбору технологічних параметрів виготовлення та експлуатації нанорозмірних пристроїв» показав, що у зв'язку із збільшенням нанорозмірних виробів, в яких використовується титан, є актуальним і перспективним напрямом.

2. Встановлено, що перспективи впровадження з огляду на стан авіа- та машинобудування і потенційні групи клієнтів не достатньо високі, але

позитивним є те, що конкурентні технології, які використовуються на сьогодні, не в змозі забезпечити всіх тих переваг, які дозволяє досягти запропонована у стартап-проекті методика.

5 ОХОРОНА ПРАЦІ ТА БЕЗПЕКА В НАДЗВИЧАЙНИХ СИТУАЦІЯХ

Метою цього розділу є аналіз шкідливих та небезпечних факторів, при яких виникає небезпека ураження організму, умов, що можуть привести до травмування в процесі теоретичного дослідження параметрів поверхневої самодифузії в Ті, визначені моделюванням методом молекулярної динаміки, а також розробка заходів спрямованих на усунення цих факторів.

У даному розділі розглянуто засоби охорони праці під час виконання досліджень, що проводилася на персональному комп'ютері.

Аналізуючи умови праці при виконанні даної НДР потрібно розглянути наступні чинники:

- мікроклімат;
- склад повітря робочої зони;
- освітлення;
- електричний струм;
- випромінювання від комп'ютера.

5.1 Аналіз роботи в приміщенні

Науково-дослідницька робота виконувалась на кафедрі фізики металів інженерно-фізичного факультету КПІ ім. Ігоря Сікорського в корпусі № 9, на 5 поверсі в кімнаті № 504. Схема кімнати представлена на рис. 5.1.

Приміщення, в якому виконувалася НДР, має наступні установки:

1 – робочий стіл; 2 – комп'ютер; 3 – шафа; 4 – двері; 5 – вікно.

Було проведено вимірювання приміщення аудиторії та вікон, які наведені нижче:

- розміри аудиторії: ширина – 3 м, довжина – 6 м, висота – 2,7 м.
- розміри вікон: ширина – 2,7 м, висота – 2,5 м.

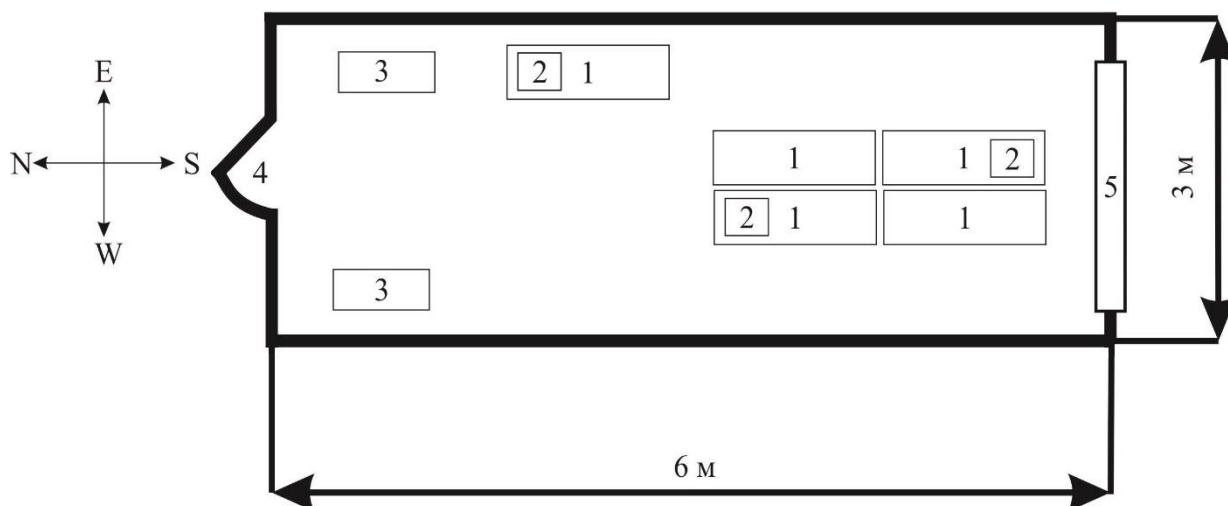


Рисунок 5.1 – Схема аудиторії в якій виконувалася науково-дослідницька робота

Аудиторія, в якій працює двоє чоловік має площу 18 м^2 , об'єм 49 м^3 . Площа, яка приходить на одну людину – 9 м^2 , об'єм $\sim 24,5 \text{ м}^3$. Таким чином площа та об'єм аудиторії, згідно з ДБН В.2.2-28-2010, де на одну людину повинно приходитись не менше 6 м^2 площі та 20 м^3 об'єму, відповідають нормам [56].

Важливе значення для нормальної працездатності людини має чисте повітря потрібного хімічного складу і оптимальної температури, вологості та швидкості руху, тому виконання науково-дослідної роботи супроводжувалося дослідженням мікроклімату в приміщенні лабораторії. При дослідженні мікроклімату знаходять такі складові: температура, рухливість повітря робочої зони та зіставлення результатів з встановленими нормами [56]. Також розрізняють категорії робіт за важкістю: Легка Іа, Легка Іб, Середньої важкості Іа, Середньої важкості Іб, Важка ІІІ.

Згідно з [57] категорія важкості робіт – І б. Вона містить легкі фізичні роботи до 150 Ккал/год . Результати дослідження та нормовані величини параметрів мікроклімату в робочій зоні кімнати 504 наведені у таблиці 5.1

У приміщенні науково-дослідницької лабораторії використовується водяне опалення та природна вентиляція.

Таблиця 5.1 – Величина параметрів мікроклімату в робочій зоні приміщення лабораторії 504

Період року	Температура повітря, °С		Відносна вологість, %		Швидкість руху повітря, м/с	
	Виміряна	Допустима	Виміряна	Допустима	Виміряна	Допустима
Холодний	20	17...25	70	<75	0,1	<0,2
Теплий	23	19...30	55	<60, при 27 °С	0,2	0,1...0,3

Можна зробити висновок, що мікроклімат в кімнаті 504 відповідає вимогам санітарних норм.

5.1.1 Склад повітря робочої зони

Чистота повітря в лабораторії визначається вмістом шкідливих речовин та пилом. Вміст шкідливих речовин в повітрі робочої зони не повинен перевищувати гранично допустимих концентрацій, які використовуються при проектуванні виробничих будівель, технологічних процесів, обладнання, вентиляції. За ГОСТ 12.1.005-88 [58] встановлені гранично допустимі концентрації шкідливих речовин в повітрі робочої зони виробничих приміщень. Надходження до повітря робочої зони тієї чи іншої шкідливої речовини залежить від технологічного процесу, сировини, що використовується.

У даній лабораторії з матеріалами, які використовуються в твердому стані не проводяться процеси полірування, шліфування та травлення, а також щодня проводиться вологе прибирання приміщення. З вищенаведеного можна сказати, що шкідливі речовини та запиленість приміщення не перевищує допустимих значень.

5.2 Електробезпека

Кімната № 504, в якій проводилася науково-дослідницька робота відносять до приміщення без підвищеної небезпеки, відповідно до джерела [57]. Електричні прилади живляться напругою 220 В (комп'ютери та орг. техніка) зі змінним струмом та частотою 50 Гц.

Причинами ураження електричним струмом є :

- пошкодження ізоляції та, як наслідок, доступність до струмоведучих частин обладнання;
- поява напруги на відключених струмоведучих частинах внаслідок помилкового включення установки;
- невиконання або неправильне виконання вимог техніки електробезпеки, неуважність при роботі.

Причинами враження електричним струмом під час виконання трудового процесу з електрообладнанням є:

- 1) випадковий дотик до струмоведучих частин, які перебувають під напругою, через відсутність засобів недоступності або безвідповідальне відношення до безпеки персоналу;
- 2) дотик до неструмоведучих частин електроприладів випадково потраплених під напругу через ушкодження ізоляції чи іншого ушкодження;
- 3) потрапляння під напругу під час проведення ремонтних робіт на відключених електроприладах через помилкове їх включення.

Гранично допустимий струм через людину при нормальному (неаварійному) режимі роботи електроустановки не повинен перевищувати 0,3 мА для перемінного струму і 1 мА для постійного [59].

На тяжкість ураження струмом впливають такі фактори [59]:

- вплив стану шкіряного шару (порізи, подряпини, зволоження, збільшене потовиділення, забруднення шкіряного шару можуть призвести до значного зменшення загального опору тіла людини електричному струму);

- вплив параметрів електричного струму (постійний чи змінний струм, величина електричного струму).

Небезпека для організму людини тим менша, чим менша тривалість впливу струму. При тривалому впливі струму опір тіла людини падає і струм зростає до значення, здатного викликати зупинку дихання або навіть фібриляцію серця. Підвищена вологість повітря, струмовідний пил та хімічно активні домішки знижують опір ізоляції електроустановки, сприяють переходу напруги на не струмовідні частини установки, коротким замиканням тощо і, таким чином, підвищують небезпеку електротравм [59].

Протікання електричного струму через організм людини являє собою складний процес, який супроводжується значним спектром фізико-біологічних та хімічних реакцій, основними з яких є термічна, електролітична, механічна та біологічна. Термічна реакція тканин організму людини виникає внаслідок перетворення електричної енергії в теплову. Електролітична дія електричного струму на живі тканини полягає в розкладанні внутрішньоклітинної органічної рідини на іони. Механічна реакція організму людини на протікання електричного струму виявляється у вигляді електродинамічного ефекту, який полягає, наприклад, у різкому скороченні м'язових тканин. Біологічна реакція організму людини на електричний струм формується в результаті його дії на внутрішні біоелектричні процеси, в подразненні живих тканин [60].

У кімнаті, де проводилися дослідження, правильно виконане захисне заземлення корпусів, електроустаткування і приладів. Розташування робочих місць таке, що виключається можливість одночасного доторкання до корпусів, електроустаткування і приладів, відповідно до джерела [61].

5.3 Інженерні рішення

5.3.1 Освітлення

Правильно підібране освітлення надає нормальні умови для організації робочого процесу. Освітлення буває трьох видів: природне, штучне і суміщене.

Природне в свою чергу поділяється на бічне, верхнє та комбіноване. Штучне – загальне та місцеве [61].

Погане освітлення виробничої зони може призвести до погіршення якості виконуваних робіт, наприклад, можуть залишитися непоміченими розриви, що з'явилися, потертості, витік палив і олій, механічні домішки в паливі й інше, що, у свою чергу, призводить до зниження безпеки праці. Погане освітлення виробничих територій може стати причиною багатьох важких і смертельних випадків, таких, як наїзд самохідних засобів механізації, що рухаються.

Коли правильно розраховано і підібрано освітлення виробничих приміщень, очі працюючого протягом тривалого часу зберігають здатність добре розрізняти предмети і знаряддя праці. Такі умови освітлення сприяють зниженню виробничого травматизму і професійного захворювання очей.

До переваг природного освітлення можна віднести те, що воно сприятливо впливає на органи зору та покращує розвиток організму у цілому. До недоліків відносять – непостійне освітлення у різні періоди доби та року; нерівномірний розподіл освітленості по площі виробничого приміщення; можливість засліплення органів зору [62]. Недостатня або надмірна освітленість можуть стати причиною розвитку короткозорості, зниження гостроти зору [63].

Природне і штучне освітлення в приміщеннях регламентується нормами ДБН В.2.5.28-2006 від характеристики зорової роботи, найменшого розміру об'єкта розрізнення, розряду зорової роботи (I-VIII), системи освітлення, характеристики фону, контрасту об'єкта розрізнення з фоном.

У кімнаті здійснюється природне бокове освітлення, вікна з південного боку. Відстань до місця основної роботи складає 1,5 м. Робота, що виконується відноситься до роботи середньої точності (четвертий розряд зорових робіт). Освітлення лабораторії природне та штучне. Для місцевого освітлення використовуються лампи розжарювання, для загального – люмінесцентні ЛБ-40 (20 одиниць у кімнаті). Освітлення кімнати відповідає встановленому по ДБН В.2.5.28-2006 рівню в 200 лк [63].

Також застосовувалися спеціальні окуляри (рис. 5.2) для захисту очей від негативного впливу екрану комп'ютера.



Рисунок 5.2 – Окуляри для захисту очей

5.3.2 Аналіз природного освітлення

Основне розрахункове рівняння при боковому природному освітленні має вигляд [64]:

$$\frac{(100 \cdot S_0)}{S_n} = \frac{(e \cdot K_z \cdot \eta_B \cdot K_{б\text{уд}})}{\tau_0 \cdot r_1} \quad (5.1)$$

де e – фактичне значення КПО;

S_0 – площа вікон;

S_n – площа підлоги;

K_z – коефіцієнт запасу, який приймається згідно табл. 3 [66]. Для приміщень з нормальними умовами середовища (кабінети, навчальні, житлові кімнати, лабораторії, читальні зали) дорівнює 1.

η_B – світлова характеристика вікон (визначається з табл. Л.1[64]).

В даному випадку коефіцієнт $\eta_B = 18$ тому, що відношення довжини до глибини приміщення: $6/3=2$

Відношення глибини приміщення до його висоти рівня умовної робочої поверхні до верха вікна: $6/(2,5-0,5) = 3$;

Висота верха вікна відносно підлоги дорівнює 2,5 м.

Умовна робоча поверхня дорівнює 0,5 м від підлоги.

τ_0 – загальний коефіцієнт світлопроникнення для бокового освітлення, який визначається за формулою:

$$\tau_0 = \tau_1 \times \tau_2 \times \tau_3 \times \tau_4 \quad (5.2)$$

де τ_1 – коефіцієнт світлопропускання матеріалу, який визначається з табл. Л.3. В даному випадку 0,8, оскільки в лабораторії подвійна рама;

τ_2 – коефіцієнт, який враховує втрати світла за рахунок віконних перетинів, який визначається за табл. Л.3 [67]. В даному випадку 0,7, оскільки рама дерев'яна, спарена;

τ_3 – коефіцієнт, який враховує втрати світла в несучих конструкціях і визначається за табл. Л.3 [67] (при боковому освітленні $\tau_3 = 1$);

τ_4 – коефіцієнт, який враховує втрати світла за рахунок сонцезахисних пристроїв і визначається з табл. Л.4 [67]. Оскільки в лабораторії присутні регулюючі жалюзі, що складаються, то – 1.

$K_{б\gamma d}$ – коефіцієнт, який враховує затінювання вікон протилежними будинками, визначається з табл. Л.2 [67]. В даному випадку 1 тому, що $P/H_{б\gamma d} > 3$,

де P – відстань між двома будинками;

$H_{б\gamma d}$ – висота розміщення карнизу протилежного будинку над підвіконником вікна, що розглядається;

r_1 – коефіцієнт, який враховує підвищення КПО при боковому освітленні завдяки світлу, відбитого від поверхонь приміщення.

Значення коефіцієнта r_1 визначається за табл. Л.5 [67].

$$\rho_{стелі} = 80\% \quad S_{стелі} = 36 \text{ м}^2$$

$$\rho_{стін} = 50\% \quad S_{стін} = 64,8 \text{ м}^2$$

$$\rho_{підлоги} = 30\% \quad S_{підлоги} = 36 \text{ м}^2$$

$$\rho_{ср} = \frac{(\rho_{стелі} \times S_{стелі} + \rho_{стін} \times S_{стін} + \rho_{підлоги} \times S_{підлоги})}{(S_{стелі} + S_{стін} + S_{підлоги})} = 0,5 \quad (5.3)$$

Відношення відстані розрахункової крапки від зовнішньої стіни до глибини приміщення дорівнює 0,467.

Згідно таблиці Л.5 [67]: $r_1=1,35$

Визначимо загальний коефіцієнт світлопропускання вікон τ_0 :

$$\tau_0 = 0,8 \times 0,7 \times 1 \times 1 = 0,56$$

З рівняння (5.1) знайдемо e :

$$e = \frac{(100 \times S_0 \times \tau_0 \times r_1)}{(S_n \times K_3 \times K_{\text{буд}} \times \eta_0)} \quad (5.4)$$

Площа вікна дорівнює:

$$S_{\text{вікна}} = a \times b = 2,5 \times 2 = 5 \text{ м}^2$$

Площа підлоги $S_{\text{п}}$ становить:

$$S_{\text{п}} = a \times b = 6 \times 6 = 36 \text{ м}^2.$$

Підставивши всі значення до формули (5.4), отримаємо:

$$e = \frac{100 \times 5 \times 0,56 \times 1,35}{36 \times 1 \times 1 \times 18} \cdot 2 = 1,16$$

Розрахуємо нормоване значення КПО, e_n для нашого приміщення, за формулою:

$$e_n = e_H \times m_n \quad (5.5)$$

де e_n – значення КПО за табл. 1 та 2 [67]. Для зорових робіт середньої точності e_n становить 1,5.

m_n – коефіцієнт світлового клімату за табл. 4 [68].

Природне освітлення потрапляє в лабораторію крізь бокові вікна зорієнтовані на південь.

m_n – для південної орієнтації вікон становить 0,85.

$$e_n = 1,5 \times 0,85 = 1,275$$

З розрахунків видно, що природне освітлення не є достатнім, тому для забезпечення нормальної освітленості приміщення у кімнаті на кожному столі потрібно встановити місцеве освітлення. В разі невідповідності освітлення встановленим нормам, у працівників при тривалій роботі виникатимуть послаблення зору, головні болі, розсіяння уваги, що в свою чергу може призвести до не точного та не якісного виконання роботи.

5.3.3 Аналіз штучного освітлення

При штучному освітленні нормативною величиною є абсолютне значення освітленості, яке залежить від характеристики зорової праці та системи освітлення (загальне, комбіноване). Розрахунок освітлювальної системи може бути виконано різними способами, які базуються на двох основних методах розрахунку: за світловим потоком і точковий. Найбільш розповсюджений в проектній практиці розрахунок за методом коефіцієнта використання потоку світла. Цей метод використовується для розрахунку загального рівномірного освітлення і дає змогу визначити світловий потік джерел світла, необхідний для створення нормованого освітлення розрахункової горизонтальної площини. Цим методом враховується прямий та відбитий (від стелі, стін та підлоги) потік світла [69].

В даній роботі використаємо метод світлового потоку. Основне розрахункове рівняння має вигляд [70]:

$$F = \frac{E \times S \times K \times Z}{N \times n \times \eta} \quad (5.6)$$

де F – світловий потік джерела світла, лм;

E – нормована освітленість, лк;

S – площа приміщення, що освітлюється, м²;

K – коефіцієнт запасу, що враховує зниження освітленості в результаті забруднення та старіння ламп;

Z – коефіцієнт нерівномірності освітлення;

N – кількість світильників;

n – кількість ламп у світильнику;

η – коефіцієнт використання світлового потоку.

Коефіцієнт використання світлового потоку η визначається за світлотехнічними таблицями залежно від показника приміщення i , коефіцієнтів відбиття стін та стелі. Показник приміщення i вираховується за формулою:

$$i = \frac{a \times b}{h \times (a + b)} = \frac{6 \times 6}{2,4 \times (6 + 6)} = 1,25 \quad (5.7)$$

де a і b – ширина і довжина приміщення, м;

h – висота світильника над робочою поверхнею, м.

Користуючись даними з таблиці 13 [68] за умовою, що:

$\rho_{\text{стелі}} = 80\%$, $\rho_{\text{стіни}} = 50\%$, знаходимо: $\eta = 48\%$, або 0,48.

З рівняння (5.7) заходимо E :

$$E = \frac{F \times N \times n \times \eta}{K \times S \times Z} = \frac{3200 \times 10 \times 2 \times 0,48}{1,5 \times 36 \times 1,1} = 517 \text{ лк} \quad (5.8)$$

де F для ламп ЛБ = 3200 лм;

K = для ламп ЛБ становить 1,5.

$Z = 1,1$ для люмінесцентних ламп;

$N = 10$ шт.; $n = 2$ шт.; $\eta = 0,48$; $S = 36 \text{ м}^2$

Згідно ДБН В.2.5–28–2006 норма освітлення становить 200 лк. Отримане значення E перевищує норму тобто, штучне освітлення є достатнім.

5.4 Забезпечення безпеки та запобігання надзвичайним ситуаціям

Надзвичайна ситуація – обстановка на окремій території чи суб'єкті господарювання на ній або водному об'єкті, яка характеризується порушенням нормальних умов життєдіяльності населення, спричинена катастрофою, аварією, пожежею, стихійним лихом, епідемією, епізоотією, епіфітотією, застосуванням засобів ураження або іншою небезпечною подією, що призвела (може призвести) до виникнення загрози життю або здоров'ю населення, великої кількості загиблих і постраждалих, завдання значних матеріальних збитків, а також до неможливості проживання населення на такій території чи об'єкті, провадження на ній господарської діяльності.

Запобігання виникненню надзвичайних ситуацій – комплекс правових, соціально-економічних, політичних, організаційно-технічних, санітарно-гігієнічних та інших заходів, спрямованих на регулювання техногенної та природної безпеки, проведення оцінки рівнів ризику, завчасне реагування на загрозу виникнення надзвичайної ситуації на основі даних моніторингу,

експертизи, досліджень та прогнозів щодо можливого перебігу подій з метою недопущення їх переростання у надзвичайну ситуацію або пом'якшення її можливих наслідків [69].

Під час виконання науково-дослідницької роботи можливе виникнення наступних надзвичайних ситуацій: пожежі, землетрусу, вибуху, аварії на електроенергетичних системах, руйнування будівлі.

5.4.1 Пожежна безпека

Пожежна безпека об'єкта – стан об'єкта, за яким з регламентованою імовірністю виключається виникнення і розвитку пожежі та впливу на людей її небезпечних факторів, а також забезпечується захист матеріальних цінностей .

Основними напрямками забезпечення пожежної безпеки є усунення умов виникнення пожежі та мінімізація її наслідків

Проаналізуємо імовірність виникнення пожежі в приміщенні та засобів її запобігання.

Відповідно до ДСТУ Б В.1.1-36:2016 приміщення кімнати 504-9 за пожежонебезпекою відноситься до категорії «В» (в лабораторії є горючі та важко горючі рідини, також тверді горючі та важко горючі речовини). Приміщення в якому вони знаходяться не відносяться до категорії А або Б). У приміщенні найбільш пожежонебезпечним місцем є місце де розміщено комп'ютерну техніку, місце де прокладена електропроводка. Загоряння може відбутися через коротке замикання в електропроводці [71]. Кімната водою із загальної мережі водопроводу, порошковими вогнегасниками оснащена для гасіння пожежі. План евакуації в разі виникнення пожежі наведено на рис. 5.2.

Із засобів пожежогасіння у лабораторії є вогнегасники ОУБ-2 (вуглекислотно-брометиловий). Умови роботи задовольняють обмеженням на використанні вогнегасників цих типів (напруга електропристроїв не більше, ніж 1000 В). Засобами виявлення й оповіщення про пожежу є автоматичні датчики-сигналізатори про пожежу типу ДТП, що реагують на підвищення температури. У

випадку пожежі на електроустановці, що знаходиться під напругою виникле полум'я не гаситься водою, а використовується вуглекислотний чи вуглекислотноброметильовий вогнегасник.

Основними заходами по пожежній безпеці є регулярна перевірка працездатності засобів гасіння пожежі і систем пожежної сигналізації; перевірка виправності електричної проводки; щорічне випробування опору ізоляції підвищеною напругою близько 500 В; обережне відношення з легкоплавкими речовинами.

Засобом оповіщення співробітників про пожежу служить внутрішній службовий зв'язок. На випадок пожежі є план евакуації працівників з будівлі (рис. 5.3).

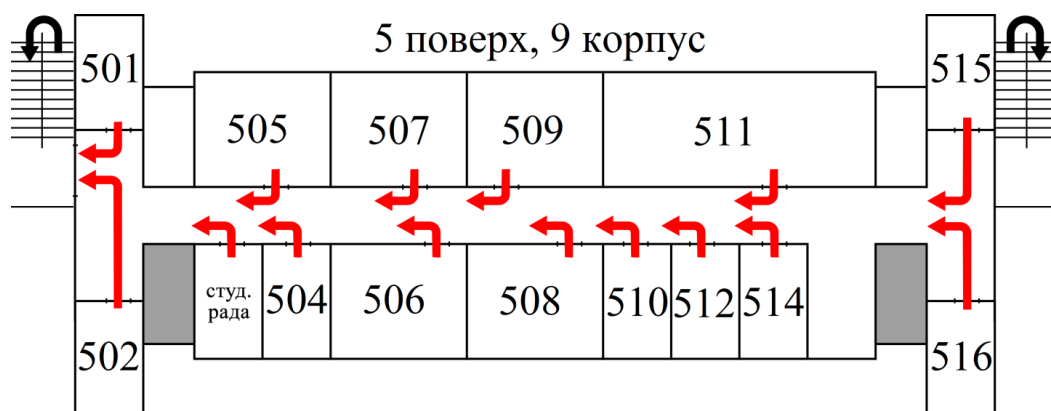


Рисунок 5.3 – План евакуації

5.5.2 Вимоги безпеки в аварійних ситуаціях

У випадку пробією електричної напруги на корпус зварювального агрегату необхідно відключити рубильник і довести до відома про це майстра або начальника дільниці.

У випадку потрапляння кого-небудь під напругу, необхідно відключити зварювальний агрегат від мережі, покласти потерпілого на дерев'яний настил, підклавши під голову ватник, викликати лікаря за телефоном 103 і, якщо це необхідно, зробити пострадалому штучне дихання.

У випадку загорання зварювального агрегата необхідно відключити рубильник і приступити до гасіння пожежі за допомогою вогнегасника.

Кожен робітник і службовець, що виявив пожежу або загорання, зобов'язаний:

- негайно сповістити про це в заводську пожежну охорону за телефоном 101;
- приступити до гасіння вогню пожежі наявними в цеху (на ділянці) засобами пожежогасіння (вогнегасник, пісок, пожежний кран тощо);
- викликати до місця пожежі посадових осіб. У випадку одержання травми необхідно довести до відома про це головного інженера або начальника лабораторії та звернутися в медпункт.

5.5 Висновки до розділу 5

1. В даній роботі дослідження, які проводяться згідно плану, є екологічно чистими і не є джерелом забруднення навколишнього середовища.

2. Проведений аналіз шкідливих та небезпечних факторів, передбачає умови при яких може виникнути небезпека ураження організму.

3. Мікроклімат, організація робочого місця, освітлення в лабораторії відповідають вимогам санітарних норм. А рівень шуму, вібрацій та випромінювання не перевищує допустимих норм.

ВИСНОВКИ

- 1) Коефіцієнт дифузії в об'ємі для чистого титану змінюється від 10^{-37} см²/с при 300 К до 10^{-17} см²/с при 1100 К
- 2) Вільна поверхня монокристалу титану призводить до виникнення структурних недосконалостей кристалічної ґратки в поверхневих шарах, а ступінь структурних недосконалостей пропорційна напруженням. Напруження (структурні недосконалості) залежать від орієнтації поверхневих площин та температури.
- 3) Напруження в кристалічній ґратці призводять до зміни енергії формування вакансій, а також їх рівноважних концентрацій, що відповідно впливає на коефіцієнт дифузії. Оскільки напруження, викликані дією вільної поверхні, різні в різних напрямках, то і коефіцієнт дифузії в цих напрямках буде різним.
- 4) Отримана залежність параметрів коефіцієнту дифузії в залежності від температури та напружень дозволяє проводити оцінку коефіцієнту дифузії для структур титану з дефектами (поверхнева область, область границь зерен та ін.)
- 5) Для грані титану (0001) глибина впливу становить 1 атомну площину. Для 300 К коефіцієнт дифузії в цій площині на 12 порядків вище, ніж в об'ємі, і становить 10^{-25} см²/с, при 1100 К на 7 порядків вище, ніж в об'ємі, і становить 10^{-11} см²/с.
- 6) Для грані титану (1 $\bar{1}$ 00) глибина впливу становить 2 атомні площини. Для 300 К коефіцієнт дифузії в першій площині на 14 порядків вище, ніж в об'ємі, і становить 10^{-23} см²/с, при 1100 К на 7 порядків вище, ніж в об'ємі, і становить 10^{-11} см²/с.
- 7) Для грані титану (11 $\bar{2}$ 0) глибина впливу становить 3 атомні площини. Для 300 К коефіцієнт дифузії в першій площині на 7 порядків нижче, ніж в об'ємі, і становить 10^{-44} см²/с, при 1100 К на 4 порядків вище, ніж в об'ємі, і становить 10^{-14} см²/с.

- 8) Аналіз ринкової спроможності стартап-проекту «Створення бази даних параметрів самодифузії для титану в залежності від температури, напружень, відстані від поверхні, з метою використання її для підбору технологічних параметрів виготовлення та експлуатації нанорозмірних пристроїв» показав, що у зв'язку із збільшенням нанорозмірних виробів, в яких використовується титан, є актуальним і перспективним напрямом.
- 9) Мікроклімат, організація робочого місця, освітлення в лабораторії відповідають вимогам санітарних норм. А рівень шуму, вібрацій та випромінювання не перевищує допустимих норм.

CONCLUSIONS

- 1) The bulk self-diffusion coefficient for pure titanium varies from $10^{-37} \text{ cm}^2 / \text{s}$ at 300 K to $10^{-17} \text{ cm}^2 / \text{s}$ at 1100 K
- 2) The free surface of a monocrystal of titanium leads to the appearance of structural imperfections of the crystalline lattice in the surface layers, and the degree of structural imperfections is proportional to the stress. Tensions (structural imperfections) depend on the orientation of the surface planes and temperature.
- 3) The tension in the crystal lattice leads to a change in the energy of the formation of vacancies, as well as their equilibrium concentrations, which respectively affects the diffusion coefficient. Since the stresses caused by the action of the free surface are different in different directions, then the diffusion coefficient in these directions will be different.
- 4) The obtained diffusion coefficient, depending on temperature and stress, allows us to estimate the diffusion coefficient for the structures of the titanium with defects (surface area, grain boundary region, etc.).
- 5) For the surface of titanium (0001), the impact depth is 1 atomic plane. For 300 K, the diffusion coefficient in this plane is 12 orders of magnitude higher than in volume and is $10^{-25} \text{ cm}^2 / \text{s}$, at 1100 K is 7 orders of magnitude higher than in volume and is $10^{-11} \text{ cm}^2 / \text{s}$.
- 6) For the face of titanium (1 $\bar{1}$ 00), the depth of influence is 2 atomic planes. For 300 K, the diffusion coefficient in first plane is 14 orders of magnitude higher than in volume and is $10^{-23} \text{ cm}^2 / \text{s}$, at 1100 K is 7 orders of magnitude higher than in volume and is $10^{-11} \text{ cm}^2 / \text{s}$.
- 7) For the face of titanium (11 $\bar{2}$ 0), the impact depth is 3 atomic planes. For 300 K, the diffusion coefficient in first plane is 7 orders of magnitude higher than in volume and is $10^{-44} \text{ cm}^2 / \text{s}$ at 1100 K 4 times higher than in volume and is $10^{-14} \text{ cm}^2 / \text{s}$.
- 8) An analysis of the market situation of the development project "Creating a database of self-diffusion parameters for titanium, depending on temperature, stresses,

distance from the surface, for the purpose of using it for the selection of technological parameters for the fabrication and operation of nanoscale devices," showed that in connection with the increase Nanosized products that use titanium are relevant and promising.

9) Microclimate, organization of the workplace, lighting in the laboratory meet the requirements of sanitary norms. And the noise, vibration and radiation levels do not exceed the permissible limits.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Валуев А.А. Метод молекулярной динамики: теория и приложения / А.А. Валуев, Г.Э. Норман, В.Ю. Подлипчук // В кн.: Математическое моделирование. Физико-химические свойства вещества. М.: Наука, 1989. стр. 5 – 40.
2. Хеерман Д.В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. / Д. В. Хеерман // М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1990. – стр.50 – 75.
3. Гулд Х. Компьютерное моделирование в физике (в 2-х томах)./ Х. Гулд Я. Тобочник // М.: Мир, 1990. Стр. 97 – 160.
4. Рит М. Наноконструирование в науке и технике. Введение в мир нанорасчета. / М. Рит // Ижевск: РХД, 2005. – с.100 – 137.
5. Мансури Г.А. Принципы нанотехнологии. Исследование конденсированных веществ малых систем на молекулярном уровне. / Г.А. Мансури // М.: Мир, 2008. – стр.64 – 96.
6. Allen M.P. Computer simulation of liquids. / M.P. Allen, D.J. Tildesley // Oxford: Clarendon Press, 1987. Стр. 140 – 187.
7. Frenkel D. Understanding molecular dynamics. / D. Frenkel, B. Smit // From algorithms to applications. Academic Press, New York, 2002. Стр. 98 – 127.
8. Ercolessi F. A Molecular dynamics primer. / F. A Ercolessi // International School of Advances Studies (SISSA-ISAS), Trieste, Italy, 2008. – стр.149 – 200.
9. Сайт програми LAMMPS [Електронний ресурс] – Режим доступу – <http://lammps.sandia.gov> – Дата доступу: 14.09.2018.
10. Назаров А.А. Атомистическое моделирование материалов, наноструктур и процессов нанотехнологии / А.А. Назаров, Р.Р. Мулюков // Уфа РИО БашГУ 2010. Стр. 134 – 147.
11. Науковий портал KnowledgeDoor [Електронний ресурс] – Режим доступу – <http://www.knowledgedoor.com> – Дата доступу: 20.09.2018.
12. Kim H.-K. Modified embedded-atom method interatomic potentials for the Fe-Ti-C and Fe-Ti-N ternary systems. / H.-K. Kim, , W.S. Jung, B.-J. Lee, // Acta Materialia, 2009. Стр. 57 – 103.

13. Kaur I. Fundamentals of Grain and Interphase Boundary Diffusion / I.Kaur, Y. Mishin, and W. Gust // John Wiley & Sons, Chichester, New York, 1995.
14. Mishin Y. In Diffusion Processes in Advanced Technological Materials, / Y. Mishin, D. Gupta // William Andrew, Norwich, NY, 2005, p. 113.
15. Shewmon P. G., Diffusion in Solids / P. G. Shewmon // McGraw-Hill, New York, 1963.
16. First-Principles Calculation of Self-Diffusion Coefficients / M. Mantina, Y. Wang, R. Arroyave, L. Q. Chen, Z. K. Liu, C. Wolverton // Phys. Rev. Lett. 100, 215901 2008.
17. Foiles S. M. Evaluation of harmonic methods for calculating the free energy of defects in solids / S. M. Foiles // Phys. Rev. B 49, 14930 1994.
18. Mendelev M. I. Simulation of the interaction between Fe impurities and point defects in V / M. I. Mendelev, B. Bokstein // Mater. Lett. 61, 2911 2007.
19. Mendelev M. I. Analysis of semi-empirical interatomic potentials appropriate for simulation of crystalline and liquid Al and Cu / M. I. Mendelev, M. J. Kramer, C. A. Becker, M. Asta // Phi- los. Mag. 88, 1723 2008.
20. Mendelev M. I. Molecular dynamics study of vacancy migration in Al / M. I. Mendelev, B. S. Bokstein // Philos. Mag. (to be published).
21. Mendelev M. I. Molecular dynamics study of self-diffusion in bcc Fe /M. I. Mendelev, Yuri Mishin // Physical Review B. – 2009. – oct. – Vol. 80,no. 14
22. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films: article / Novoselov K. S., Geim A. K., Morozov S. V., Jiang D., etc., Science 2004, 306, 666 .
23. Large area, few-layer graphene films on arbitrary substrates by chemical vapor deposition: article / Reina A., Jia X., Ho J., Nezich D., etc., Nano Lett. 2009, 9, 30 .
24. Large-scale pattern growth of graphene films for stretchable transparent electrodes: article / Kim K. S., Zhao Y., Jang H., Lee S. Y., etc., Nature 2009, 457, 706 .
25. Large Domain Graphene: article / Li X. S., Cai W. W., An J. H., Kim S., etc., Science 2009, 324, 1312 .
26. Highly conducting graphene sheets and Langmuir-Blodgett films: article / Li X., Zhang G., Bai X., Sun X., etc., Nat. Nanotechnol. 2008, 3, 538

27. High-yield production of graphene by liquid-phase exfoliation of graphite: article / Hernandez Y., Nicolosi V., Lotya M., Blighe F. M., etc., Nat. Nanotechnol. 2008, 3, 563 .
28. Transfer of large-area graphene films for high-performance transparent conductive electrodes: article / Li X. S., Zhu Y. W., Cai W. W., Borysiak M., etc., Nano Lett. 2009, 9, 4359 .
29. Geim Andre Konstantin. Graphene: Status and Prospects: article / A. K. Geim , Science 2009, 324, 1530
30. A reliable way of mechanical exfoliation of large scale two dimensional materials with high quality: article / Liu Q., Liu Z., Zhang X., Zhang N., etc., Appl. Phys. Lett. 2008, 92, 223303
31. Dye-sensitized solar cell based carbon nanotube as counter electrode: article / Hong W. J., Xu Y. X., Lu G. W., Li C., etc., Electrochem. Commun. 2008, 10, 1555 .
32. Organic Photovoltaic Devices Based on a Novel Acceptor Material: Graphene: article / Liu Z. F., Liu Q., Huang Y., Ma Y. F., etc., Adv. Mater. 2008, 20, 3924
33. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene: article / Novoselov K., Geim A., Morozov S., Katsnelson M., etc., Nature, 2005, 438, 197
34. Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene: article / Zhang Y., Tan Y., Stormer H. and Kim P., Nature, 2005, 438, 201
35. Graphene segregated on Ni surfaces and transferred to insulators: article / Yu Q., Lian J., Siriponglert S., Li H., etc., Appl. Phys. Lett., 2008, 93, 113103
36. Roll-to-roll production of 30-inch graphene films for transparent electrodes: article / Bae S., Kim H., Lee Y., Xu X., etc., Nature Nanotech., 2010, 5, 574
37. Intrinsic Response Time of Graphene Photodetectors: article / Lee E. J. H., Balasubramanian K., Weitz R. T., Burghard M., etc., Nature Nanotech., 2008, 3, 486
38. First-principles study of the interaction and charge transfer between graphene and metals: article / Khomyakov P. A., Giovannetti G., Rusu P. C., Brocks G., etc., Phys. Rev. B, 2009, 79, 19542525

39. Vertical conduction mechanism of the epitaxial graphene/n-type 4H-SiC heterojunction at cryogenic temperatures: article / Khomyakov P. A., Starikov A. A., Brocks G. and Kelly P. J., *Phys. Rev. B*, 2010, 82, 115437
40. Induced magnetism of carbon atoms at the graphene/Ni(111) interface: article / Bertoni G., Calmels L., Altibelli A. and Serin V., *Phys. Rev. B*, 2004, 71, 075402
41. Electronic structure and magnetic properties of the graphene/Fe/Ni(111) intercalation-like system: article / Weser M., Voloshina E. N., Horn K. and Dedkov Y. S., *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2011, 13, 7534
42. Bocquet Marie-Laure. Adsorption and diffusion of the Rh and Au adatom on graphene moiré/Ru(0001): article / J. Wintterlin and M. L. Bocquet, *Surf. Sci.*, 2009, 603, 1841
43. Batzill Matthias. Growth of a two-dimensional dielectric monolayer on quasi-freestanding graphene: article / M. Batzill, *Surf. Sci. Rep.*, 2012, 67, 83
44. Restoring a nearly free-standing character of graphene on Ru(0001) by oxygen intercalation: article / Dedkov Y. S., Horn K., Preobrajenskij A. and Fonin M., in *Graphene Nanoelectronics*, Springer, Berlin 2012
45. Laser direct growth of graphene on silicon substrate: article / Eom D., Prezzi D., Rim K. T., Zhou H., etc., *Nano Lett.*, 2009, 9, 2844
46. Structure and magnetic properties of ultra thin textured EuO films on graphene: article / Busse C., Lazic P., Djemour R., Coraux J., etc., *Phys. Rev. Lett.*, 2011, 107, 036101
47. Growth and oxidation of graphene on Rh(111): article / Wang B., Caffio M., Bromley C., Früchtl H., etc., *ACS Nano*, 2010, 4, 5773
48. Graphene on metallic surfaces: Problems and perspectives: article / Voloshina E. N., Dedkov Y. S., Torbrügge S., Thissen A., etc., *Appl. Phys. Lett.*, 2012, 100, 241606
49. Grüneis Alexander. Low-temperature quantum transport in CVD-grown single crystal graphene: article / A. Gruneis and D. Vyalikh, *Phys. Rev. B*, 2008, 77, 193401

50. Dedkov Yuriy. Electronic and magnetic properties of the graphene–ferromagnet interface: article / Y. S. Dedkov and M. Fonin, *New J. Phys.*, 2010, 12, 125004
51. Metal-Organic interaction probed by First Principles STM simulations: article / T. Brugger, S. Guenther, Wang B., Dil J. H., etc., *Phys. Rev. B*, 2009, 79, 045407
52. The formation of an energy gap in graphene on ruthenium by controlling the interface: article / C. Enderlein, Y. S. Kim, Bostwick A., Rotenberg E., etc., *New J. Phys.*, 2010, 12, 033014
53. Electronic structure of bilayer graphene physisorbed on metal substrates: article / A. Varykhalov, Scholz M., Kim T. and Rader O., *Phys. Rev. B*, 2010, 82, 121101
54. Grüneis Andreas. The quasiparticle band dispersion in epitaxial multilayer silicene: article / A. Gruneis, K. Kummer and D. Vyalikh, *New J. Phys.*, 2009, 11, 073050
55. Doping graphene with metal contacts: article / G. Giovannetti, Khomyakov P. A., Brocks G., Karpan V. M., etc., *Phys. Rev. Lett.*, 2008, 101, 026803
56. Закон України "Про охорону праці", затверджений Постановою Верховної Ради України від 21.11.2002 р. № 229-IV.
57. Гандзюк М.П. Основи охорони праці: Підручник. – 5-те вид./ М.П. Гандзюк, Є.П. Желібо, М.О. Халімовський // К.: Каравела, 2011. – 384 с.
58. Дсан ППН 3.32.007–98 – Будівельні норми і правила.
59. ДСН 3.3.6.042–99 – Санітарні норми мікроклімату виробничих приміщень.
60. ГОСТ 12.1.005-88 – Общие санитарно-гигиенические требования к воздуху рабочей зоны.
61. Основи охорони праці: Підручник. 2-ге видання, доповнене та перероблене. / К.Н. Ткачук, М.О. Халімовський, В.В. Зацарний, [та ін.]. За ред. К. Н. Ткачука і М. О. Халімовського. — К.: Основа, 2006 — 448 с.
62. Голінько В.І. Основи охорони праці: підручник / В.І. Голінько // М-во освіти і науки України; Нац. гірн. ун-т. – 2-ге вид. – Д.: НГУ, 2014. – 271 с.

63. Серіков Я.О. Основи охорони праці: Навчальний посібник для студентів вищих закладів освіти / Я.О. Серіков // Харків, ХНАМГ, 2007. - 227с.
64. ДБН В.2.5-28-2006 – Природне і штучне освітлення.
65. Москальова В.М. Охорона праці: Інтерактивний комплекс навчально-методичного забезпечення / В.М. Москальова // Рівне: НУВГП, 2009.
66. Електричне освітлення та опромінення [Текст] : методичні вказівки до виконання курсової роботи для студентів факультету енергетики та автоматики / Національний університет біоресурсів і природокористування України ; уклад. Л. С. Червінський [та ін.]. - К. : Видавничий центр НУБіП України, 2014. - 59 с.
67. ДСН 3.3.6.037-99 – Санітарні норми виробничого шуму, ультразвуку та інфразвуку.
68. ПУЕ-86 – Правила улаштування електроустановок.
69. ГОСТ 12.1.009-76 – Система стандартів безпеки труда. Электробезопасность.
70. Кодекс цивільного захисту України, затверджений Верховною Радою України від 02.10.2012р. № 5403-V.
71. ДСТУ Б В.1.1-36:2016 – Визначення категорій приміщень, будинків, установок за вибухопожежною та пожежною небезпекою